PUBLICATIONS DE L'UNIVERSITE DE NANCY
COLLECTIONS DES THESES DE LA FACULTE DES SCIENCES
– PHYSIQUES –

THESE

PRESENTEE A LA FACULTE DES SCIENCES DE L'UNIVERSITE DE NANCY POUR OBTENIR LE GRADE DE DOCTEUR ES SCIENCES PHYSIQUES

PAR MADELEINE FELDEN
maître assistante à la Faculté des Sciences

SUJET

ETUDE QUANTIQUE DES INTERACTIONS ELECTRON ATOME D'HYDROGENE CALCUL DES SECTIONS EFFICACES D'EXCITATION ET D'IONISATION

SOUTENUE LE 2 Juillet 1970, DEVANT LA COMMISSION D'EXAMEN

JURY :

MM.	J. BARRIOL	Président
	J. LEGRAS	Examinateurs
	A. HADNI	Examinateurs
	G. AMBROSINO	Invité

1970

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41555807_0011

PUBLICATIONS DE L'UNIVERSITE DE NANCY
COLLECTIONS DES THESES DE LA FACULTE DES SCIENCES
– PHYSIQUES –

THESE

PRESENTEE A LA FACULTE DES SCIENCES DE L'UNIVERSITE DE NANCY POUR OBTENIR LE GRADE DE
DOCTEUR ES SCIENCES PHYSIQUES

PAR **MADELEINE FELDEN**
maître assistante à la Faculté des Sciences

SUJET

ETUDE QUANTIQUE DES INTERACTIONS ELECTRON ATOME D'HYDROGENE CALCUL DES SECTIONS EFFICACES D'EXCITATION ET D'IONISATION

SOUTENUE LE 2 Juillet 1970, DEVANT LA COMMISSION D'EXAMEN

JURY :

MM.	J. BARRIOL	Président
	J. LEGRAS	Examinateurs
	A. HADNI	Examinateurs
	G. AMBROSINO	Invité

1970

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

UNIVERSITE DE NANCY — FACULTE DES SCIENCES

ANNEE SCOLAIRE 1969/70

Doyen : M. AUBRY
Assesseur : M. GAY

Doyens honoraires : MM. CORNUBERT – ROUBAULT

Professeurs honoraires : MM. RAYBAUD – LAFFITE – LERAY – JOLY – LAPORTE – EICHBORN – CAPELLE – GODEM ENT –DUBREIL – L. SCHWARTZ – DIEUDONNE – LONGCHAMBON – LETORT – DODE – GAUTHIER – GOUDET – OLMER – CORNUBERT – CHAPELLE – GUERIN – WAHL

Maîtres de Conférences honoraires : MM. LIENHART – PIERRET – Mle MATHIEU

PROFESSEURS

MM.	ROUBAULT	*Géologie*
	VEILLET	*Biologie animale*
	BARRIOL	*Chimie Théorique*
	BIZETTE	*Physique*
	GUILLIEN	*Electronique*
	LEGRAS	*Mécanique Rationnelle*
	BOLFAS	*Minéralogie*
	NICLAUSE	*Chimie*
	FAIVRE	*Physique Appliquée*
	AUBRY	*Chimie Minérale*
	COPPENS	*Radiogéologie*
	DUVAL	*Chimie*
	FRUHLING	*Physique*
	HILLY	*Géologie*
	LE GOFF	*Génie Chimique*
	SUHNER	*Physique Expérimentale*
	CHAPON	*Chimie Biologique*
	HEROLD	*Chimie Minérale Indust.*
	SCHWARTZ B.	*Exploitation Minière*
	MALAPRADE	*Chimie*
*	MANGENOT	*Botanique*
	GAYET	*Physiologie*
	HADNI	*Physique*
*	BASTICK	*Chimie*
	DUCHAUFOUR	*Pédologie*
	GARNIER	*Agronomie*
	NEEL	*Chimie Organique Indust.*
	BERNARD	*Géologie Appliquée*
*	CHAMPIER	*Physique*
*	GAY	*Chimie Biologique*
	STEPHAN	*Zoologie*
*	CONDE	*Zoologie*
*	WERNER	*Botanique*
	EYMARD	*Calcul Différentiel & Intégral*
	FELDEN	*Physique*
*	GOSSE	*Mécanique Physique*
*	DAVOINE	*Physique (ENSMIM)*
	HORN	*Physique (1er Cycle)*
*	ROCCI	*Géologie*
	Mme LUMER	*Maths*
	DELPUECH	*Chimie Physique*
	Mle HUET	*Analyse Supérieure*
	BLAZY	*Minéralogie Appliquée*

N ..... *Chimie Biologique*
N ..... *Mécanique Appliquée*
N ..... *Analyse Supérieure*
N ..... *Méthodes Mathématiques de la Physique*
N ..... *Mécanique Rationnelle*

(*) *Professeur titulaire à titre personnel*

PROFESSEURS SANS CHAIRE

Mme	BASTICK	*Chimie P.C. Epinal*
MM.	GUDEFIN	*Physique*
	VUILLAUME	*Psychophysiologie*
	FRENTZ	*Biologie Animale*
	MARI	*Chimie (ISIN)*
	DEVIOT	*Physique du Solide*
	FLECHON	*Physique P.C.*
	VIGNES	*Métallurgie*
	JURAIN	*Géologie C.B.G.*
	BALESDENT	*Thermodynamique, Chimie Appliquée (ENSIC)*
	JANOT	*Physique P.C. Epinal*
	CACHAN	*Entomologie Appl. (ENSA)*
	JACQUIN	*Pédologie & Chimie agricoles*
	MAINARD	*Physique M.P.*
	MARTIN	*Chimie P.C.*
	PAULMIER	*Mécanique Expérimentale*
	PROTAS	*Minéralogie*
	RIVAIL	*Chimie Appliquée CUCES*
	DEPAIX	*Probabilités et Statistiques*

MAITRES DE CONFERENCES

MM.	VILLERMAUX	*Génie Chimique*
	METCHE	*Biochimie appliquée (Brasserie)*
	BAUMANN	*Physique 1er Cycle*
	DURAND	*Physique*
	GRANGE	*Physique (ISIN)*
	BAVEREZ	*Chimie (ENSIC)*
	CHAMBON	*Exploit. Minière (Mines)*
	HUSSON	*Physique (ENSEM)*
	WEISSLINGER	*Physique*
	GERL	*Physique (ENSEM)*
	ROQUES	*Chimie Minérale*
	FERRIER	*Mathématiques*
	GILORMINI	*Mécanique flui. ISIN*
	HILY	*Mathématiques P.C.*
	CASTRO	*Chimie organique*
	DEXHEIMER	*Botanique*
	NOVERRAZ	*Mathématiques*
	TOURET	*Géologie*
	N	*Maths appliquées*
	N	*Mathématiques*
	N	*Mathématiques*
	N	*Mathématiques*
	N	*Physiologie animale*
	N	*Chimie (ENSIC)*
	N	*Laiterie (Ecole Lait.)*
	N	*Chimie organique*
	N	*Maths appliquées*

CHARGES D'ENSEIGNEMENTS

MM. AMARIGLIO – COEURE – DAVRAINVILLE – GIRARDEAU – OVAERT – RUYER – WEBER – PUJOL – SCHREIBER.

A FRANCK et BRICE pour qui le printemps commence demain.

REMERCIEMENTS

Ce travail a été réalisé au Laboratoire de Physique des Milieux Ionisés de la Faculté des Sciences de NANCY.

Nous sommes heureuse de présenter l'expression de notre profonde gratitude à Monsieur le Professeur J. BARRIOL qui a bien voulu accepter de présider notre Jury. En outre, ce travail lui doit beaucoup puisque c'est lui qui, il y a de longues années déjà, nous a initiée à la Mécanique Quantique et à la Recherche. De plus, Monsieur le Professeur J. BARRIOL a discuté avec nous de la forme définitive de ce travail.

Nous remercions Messieurs les professeurs J. LEGRAS et A. HADNI qui ont accepté de participer à notre Jury.

Nos sincères remerciements vont également à Monsieur G. AMBROSINO, directeur du Laboratoire Maurice de Broglie, qui a bien voulu faire partie de notre Jury et a discuté avec nous des résultats de ce travail. Son esprit critique nous a été particulièrement précieux.

Nous exprimons notre vive reconnaissance à Monsieur J.C. BRAUN, maître-assistant, qui nous a efficacement aidée dans l'exploitation numérique de nos résultats et a su nous initier à quelques secrets de l'ordinateur. Nous avons également été assistée dans cette tâche par Monsieur M. RICHARD, Ingénieur, à qui nous sommes heureuse d'exprimer toute notre sympathie.

Mademoiselle F. TOUPET a su patiemment, longuement et toujours avec compétence et bonne humeur ``cent fois sur le métier ´´remettre la frappe de cet ouvrage, elle a été aidée et soutenue par Madame BOLLER et nous sommes heureuse de leur exprimer, à toutes deux, notre gratitude qui va également à Monsieur J. MASSON pour les nombreuses courbes qu'il a réalisées avec beaucoup d'esprit d'initiative.

Enfin, ce travail n'aurait pas été possible sans l'aide financière efficace accordée par le Conseil Général de Meurthe et Moselle et la Ville de NANCY qui, par le constant intérêt qu'ils portent au Laboratoire de Physique des Milieux Ionisés de NANCY, montrent toute l'importance qu'ils attachent au développement de l'Université Lorraine.

NANCY, le 1er Juillet 1970.

"Justifier le fait et lui donner l'auréole de la valeur ."

HEGEL

INTRODUCTION

L'étude des intéractions quantiques entre particules simples ou complexes connait, depuis plusieurs années, un important développement par suite de ses implications tant sur le plan théorique de la connaissance des mécanismes fondamentaux que dans celui du vaste domaine des applications pratiques qui prennent de plus en plus d'importance. Malheureusement, même dans le cas le plus simple du choc électron-atome d'Hydrogène, l'équation de Schrödinger du système n'est pas analytiquement soluble ce qui nécessite, pour obtenir une fonction d'état, l'introduction de certaines hypothèses et approximations. Leur valadité peut être appréciée par la comparaison entre les résultats théoriques et expérimentaux, quand ces derniers existent.

L'étude qui suit a pour objet le calcul théorique des sections efficaces d'excitation et d'ionisation dans le cas du choc électron-atome d'Hydrogène. Outre les difficultés précédemment mentionnées, une autre provient du fait qu'il existe de nombreuses possibilités d'excitations alors que les résultats expérimentaux actuels, très délicats à obtenir, ne concernent guère que les sections efficaces relatives aux transitions $1s \rightarrow 2s$, $1s \rightarrow 2p$ *et à l'ionisation, (et encore ces valeurs sont peu nombreuses), comme nous le verrons dans la suite.*

La première partie a pour objet le rappel d'un certain nombre de résultats concernant la détermination des sections efficaces de collision dans le cas direct et avec échange. Le problème est mis sous forme intégrale et le comportement asymptotique des solutions, très important pour la suite, est analysé. Ensuite, les expressions analytiques des sections efficaces sont établies dans les différents cas, une attention particulière étant portée sur la détermination des amplitudes de transition. En effet, il existe deux possibilités pour exprimer ces amplitudes : l'une est appelée `` expression Prior '' et l'autre ``expression Post '', les deux étant formellement identiques si la solution du problème est exacte ce qui n'est malheureusement jamais le cas. Avec des solutions approximées, ces expressions donnent des résultats différents mais alors la théorie formelle ne permet plus de déterminer laquelle des deux est pré-

férable. Ensuite, le problème particulier du choc électron-atome d'Hydrogène est envisagé et les sections efficaces directe, d'échange et totale, sont établies pour l'excitation et l'ionisation. Enfin, les différentes méthodes théoriques sont rapidement examinées ainsi que les résultats expérimentaux et les difficultés de leur détermination.

Dans la deuxième partie, après avoir choisi la méthode des corrélations, nous en proposons une première modification. Elle consiste à tenir compte, dans la résolution de l'équation de Schrödinger du système e-H, des termes négligés dans les travaux précédents. Ceci est possible moyennant une hypothèse dont les conséquences sont analysées sur les approximations "Prior" et "Post". Pour la première, on montre que l'effet des termes négligés se traduit par une translation constante de l'énergie de l'électron incident, si l'atome d'Hydrogène est initialement dans son état fondamental, alors que pour la seconde, cette translation d'énergie est variable, de plus elle dépend des états excités. Il en résulte que l'approximation "Prior" est préférable et c'est la raison pour laquelle c'est elle que nous utilisons dans la suite. Notons à ce propos qu'il existe plusieurs travaux sur ce sujet, qui sont l'objet d'une controverse entre différents Auteurs, controverse importante en raison de ses incidences sur la validité des méthodes d'approximation. Notre modification permet d'apporter des éléments importants dans cette discussion. En effet, notre hypothèse explique la différence de comportement des deux approximations, comme on le montre dans la quatrième partie, mais elle conduit à une forme asymptotique incorrecte de la fonction d'onde puisque l'onde non perturbée n'est pas retrouvée quand le potentiel d'interaction tend vers zéro. Cependant, cette difficultée peut être surmontée avec l'approximation "Prior" parce que, dans ce cas, la translation d'énergie due aux termes négligés est constante. Ainsi, pour retrouver la forme asymptotique convenable, nous introduisons une deuxième modification qui concerne, cette fois, le potention d'attraction qui est affecté d'un facteur correctif ϵ. L'intérêt de ce terme est dû au fait qu'il reste le même, quel que soit l'état excité envisagé, si l'approximation "Prior" est utilisée. Par ailleurs, la méthode des corrélations nécessite une approximation sur le potentiel d'attraction pour résoudre l'équation du système et ce terme correctif doit l'influencer. Dans ce cas, nous pouvons également nous ramener à une méthode de Born modifiée qui contient aussi ce facteur correctif ϵ. Finalement, nous établissons ainsi deux nouvelles méthodes différentes, avec les solutions correspondantes, qui sont étudiées parallèlement dans toute la suite ce qui est possible puisqu'elles ont le même comportement asymptotique.

Il faut calculer les sections efficaces avec les deux nouvelles approximations précédemment introduites et c'est ce qui fait l'objet de la troisième partie. Les amplitudes de transition sont établies dans les deux cas, la différence provenant, avec nos deux méthodes, de la dissymétrisation des fonctions d'ondes à la suite de la séparation des variables exigée pour la résolution. L'amplitude de transition consécutive à notre première modification, c'est-à-dire en ne négligeant plus de termes dans l'équation de Schrödinger, est également calculée dans le cas des approximations `` Prior '' et `` Post ''. Enfin, nous déterminons les expressions des transitions relatives à différents états excités et à l'ionisation, expressions nécessaires pour le calcul effectif des sections efficaces.

La quatrième partie concerne la discussion des résultats numériques et leur interprétation. Après avoir rappelé les valeurs expérimentales pour les transitions $1s \rightarrow 2s$ et $1s \rightarrow 2p$, et les résultats numériques des méthodes des corrélations et de Born, nous étudions l'influence de notre première modification. Les résultats montrent que les divergences entre les approximations `` Prior '' et `` Post '' proviennent bien des termes négligés, principalement pour les états à symétrie sphérique. Cependant, comme il fallait s'y attendre par suite de la mauvaise forme asymptotique, la convergence de ces deux approximations est en désaccord avec les valeurs expérimentales. Aussi considérons nous l'effet de notre deuxième modification, dans les deux méthodes proposées, en étudiant la variation des sections efficaces $1s \rightarrow 2s$, $1s \rightarrow 2p$ et ionisation, en fonction de l'énergie, pour différentes valeurs du facteur correctif ϵ. Les courbes s'éloignent encore des valeurs expérimentales mais elles permettent de ramener les résultats de la méthode de Born modifiée sur ceux de la méthode des corrélations modifiée. De plus, pour des valeurs particulières du terme ϵ, on retrouve les trois principales méthodes utilisées dans le calcul quantique des sections efficaces de collisions atomiques, ce qui montre le caractère synthétique de cette approximation. Une étude de l'ensemble des différentes approximations nécessitées pour le calcul des sections efficaces, compte tenu des résultats acquis, montre que l'une d'entre elles (approximation `` en pic '' introduite pour calculer les éléments de matrice de transition) joue un rôle prépondérant. C'est ce qui nous amène à proposer une troisième modification concernant le calcul de cette intégrale : des raisons mathématiques nous conduisent à introduire, sous forme exponentielle, un facteur correctif θ de cette approximation. Le rôle de ce terme est étudié, pour $\epsilon = 1$, et il nous permet de ramener les valeurs de la méthode des corrélations

sur ceux de Born. Après une discussion qui montre que les facteurs ϵ et θ doivent compenser l'ensemble des approximations, qui ne peuvent être disjointes les unes des autres, l'étude des variations de ces deux termes nous permet de trouver :

a) une bonne convergence entre nos deux méthodes qui, initialement, donnaient des résultats différents.

b) cette convergence a lieu pour des valeurs qui sont en bon accord avec les valeurs des transitions expérimentalement connues, principalement pour l'excitation $1s \rightarrow 2p$, et l'ionisation.

Le point important est que, conformément aux prévisions théoriques, la valeur du terme correctif ϵ est la même pour les deux méthodes, quelle que soit la transition envisagée. Par ailleurs, la valeur du facteur θ est la même dans chaque méthode, indépendamment de la transition considérée et elle diffère très peu d'une méthode à l'autre.

Ensuite, toujours dans la quatrième partie, l'échange est introduit et on en tire la section efficace totale qui est calculée pour les transitions $1s \rightarrow 2s$ et $1s \rightarrow 2p$. A ce propos, il y a une difficulté par suite de l'indétermination d'une intégrale dans le calcul des éléments de transition, elle est levée en ne considérant plus que la masse de l'électron est négligeable par rapport à celle du noyau. Il subsiste un faible domaine d'énergie de l'électron incident (compris entre 2 et 3 Ry.) pour lequel les calculs permettent difficilement de conclure mais, par continuité analytique, on en déduit finalement que l'échange joue pratiquement très peu de rôle ce qui valide les résultats de nos deux méthodes. Pour confirmer les conclusions précédentes, les sections efficaces d'excitation sont calculées dans les deux cas, sans et avec échange, pour cinq transitions non connues expérimentalement. Nos deux approximations donnent des résultats qui restent bien convergents, principalement pour les états finaux asphériques, ce qui tend à montrer leur validité. Ils semblent préférable à ceux de la méthode de Born (également représentés) qui étaient les seuls utilisés jusqu'à présent.

Enfin, la dernière partie traite, sous forme d'annexe, des techniques de calcul numérique utilisées et elle contient les tableaux rassemblant l'ensemble des différentes valeurs des sections efficaces calculées dans ce travail.

PREMIERE PARTIE

A) – RAPPELS CONCERNANT LA DETERMINATION QUANTIQUE DES SECTIONS EFFICACES DE COLLISION

Le problème des collisions peut être traité de deux manières différentes : la première fait appel à un formalisme dépendant du temps, /1/ et /2/, les sections efficaces sont obtenues par le calcul de la probabilité de transition d'un état initial donné à un état final particulier ; la seconde est une méthode indépendante du temps, les sections efficaces sont directement reliées au comportement asymptotique des solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger. Ces deux méthodes donnent des résultats équivalents et c'est la seconde que nous allons utiliser en considérant l'équation des états stationnaires sous forme intégrale /3/, /4/, /5/, /6/ et /7/.

Soit $\hat{H}$ l'opérateur hamiltonien total, indépendant du temps, relatif à l'ensemble du système en interaction. Il peut se mettre sous la forme :

$$\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{V} \quad (1)$$

expression dans laquelle $\hat{H}_o$ représente l'opérateur hamiltonien quand les particules complexes qui entrent en interaction sont infiniment éloignées l'une de l'autre, c'est donc un opérateur non perturbé dont les vecteurs propres Φ_a et les valeurs propres E_a sont connus :

$$\hat{H}_o \, \Phi_a = E_a \, \Phi_a \quad (2)$$

$\hat{V}$ est l'opérateur interaction.

Nous allons diviser cette étude en deux parties :

La première concerne les collisions directes que l'on peut mettre sous la forme : $A + B \rightarrow A^* + B^*$. Les particules diffusées sont les particules incidentes, c'est le cas des collisions élastiques et inélastiques ou l'échange est négligé. L'état initial et l'état final, dans lesquels les deux particules complexes sont infiniment éloignées l'une de l'autre, sont respectivement caractérisés par deux vecteurs propres Φ_a et Φ_b du même hamiltonien $\hat{H}_o$.

La deuxième partie a pour objet l'étude des collisions avec réarrangement que l'on peut écrire sous forme : $A + B \rightarrow C + D$. Elles correspondent à l'étude générale des réactions. Dans notre cas, ces collisions seront utilisées quand l'échange sera considéré lors du choc entre l'électron incident et l'électron atomique. L'état final, caractérisé par Φ'_b, n'est plus vecteur propre de l'opérateur hamiltonien $\hat{H}_o$ de l'état initial mais de l'opérateur hamiltonien $\hat{H}'_o$ qui est tel que :

$$\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{V} = \hat{H}'_o + \hat{V}' \qquad (3)$$

$\hat{V}$ et $\hat{V}'$ étant les opérateurs interaction avant et après le choc.

I – ETUDE DES COLLISIONS DIRECTES $A + B \rightarrow A^* + B^*$

1) Equation intégrale du problème de collision –

L'équation de Schrödinger des états stationnaires s'écrit, en tenant compte de (1)

$$(E_a - \hat{H}_o)\,\psi_a = \hat{V}\,\psi_a \qquad (4)$$

Introduisons l'opérateur formel $(E_a - \hat{H}_o)^{-1}$ qui permet de mettre la solution (4) sous la forme :

$$\psi_a = \Phi_a + \frac{1}{E_a - \hat{H}_o}\,\hat{V}\,\psi_a \qquad (5)$$

L'expression (5), en tenant compte de (2), satisfait bien à l'équation de Schrödinger (4).

Pour voir si cet opérateur $(E_a - \hat{H}_o)^{-1}$ est bien défini, on peut l'appliquer à un état propre Φ_n du problème non perturbé :

L'équation (2) nous permet d'écrire :

$$(E_a - \hat{H}_o)\,\Phi_n = (E_a - E_n)\,\Phi_n \qquad (6)$$

L'opérateur $(E_a - \hat{H}_o)^{-1}$ multiplié à gauche de la relation (6) donne :

$$(E_a - E_n)^{-1}\Phi_n = (E_a - \hat{H}_o)^{-1}\,\Phi_n \qquad (7)$$

L'équation (7) montre que l'opérateur $(E_a - \hat{H}_o)^{-1}$ a les mêmes vecteurs propres Φ_n que $\hat{H}_o$ dont les valeurs propres sont $(E_a - E_n)^{-1}$, ce qui entraîne que l'opération de $(E_a - \hat{H}_o)^{-1}$ sur Φ_a n'est pas définie.

Pour éviter cette singularité, on remplace $(E_a - H_o)^{-1}$ par les deux opérateurs $(E_a - \hat{H}_o \pm i\epsilon)^{-1}$ avec $\epsilon \to +0$. La solution de l'équation (4) se met sous la forme :

$$\psi_a^{\pm} = \Phi_a + \underset{\epsilon \to 0^+}{\text{Limite}} \frac{1}{E_a - \hat{H}_o \pm i\epsilon} \hat{V} \psi_a^{\pm} \qquad (8)$$

Les deux équations (8) sont habituellement appelées `` Equations de Lippmann - Schwinger ´´, elles ont été obtenues par ces auteurs /1/ dans l'étude du problème des collisions par une méthode dépendant du temps.

2) Comportement asymptotique des solutions $\psi_a^{\pm}$

Considérons le choc entre une particule de masse μ et un système complexe A dont l'état interne est représenté par la variable ξ.

L'hamiltonien non perturbé s'écrit :

$$\hat{H}_o = \hat{H}(\xi) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 \qquad (9)$$

$\hat{H}(\xi)$ est relatif au système A, ses fonctions propres et valeurs propres étant respectivement $\phi_n(\xi)$ et ϵ_n. Les fonctions propres et valeurs propres de l'opérateur $\hat{H}_o$ s'écrivent :

$$\Phi_{n,k} = \phi_n(\xi)\, e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (10) \quad ; \quad E_{n,k} = \epsilon_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \qquad (11)$$

avec la condition de normation.

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \sum_n \int \phi_n(\xi)\, \phi_n^*(\xi')\, e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')}\, d\vec{k} = \delta(\xi - \xi') \quad \delta(\vec{r} - \vec{r}') \qquad (12)$$

En supposant que, dans l'état initial, la particule et le système sont infiniment éloignés l'un de l'autre, cet état est caractérisé par la fonction d'onde :

$$\Phi_{a,k_a} = \phi_a(\xi)\, e^{i\vec{k}_a \vec{r}}$$

Avec la même hypothèse pour l'état final, ce dernier est caractérisé par la fonction d'onde :

$$\Phi_{b,k_b} = \phi_b(\xi)\, e^{i\vec{k}_b \vec{r}}$$

Le passage de l'état initial à l'état final correspond à une transition du système A d'un état $\phi_a(\xi)$ à un état $\phi_b(\xi)$. Le vecteur d'onde $\vec{k}_b$ caractérisant la particule diffusée doit être tel que l'on ait conservation de l'énergie pour le système total, c'est-à-dire :

$$\epsilon_a + \frac{\hbar^2 k_a^2}{2\mu} = \epsilon_b + \frac{\hbar^2 k_b^2}{2\mu} \qquad (13)$$

L'état $\phi_b(\xi)$ n'est possible que pour :

$$\epsilon_a - \epsilon_b + \frac{\hbar^2 k_a^2}{2\mu} > 0 \qquad (14)$$

Si cette condition est satisfaite, la voie b est dite "ouverte". Les fonctions d'onde $(2\pi)^{-3/2}\Phi_{b,k}(\vec{r},\xi)$ forment un ensemble orthonormé complet ce qui permet d'écrire :

$$V(\vec{r},\xi)\,\psi_a^{\pm}(\vec{r},\xi) = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_b \phi_b(\xi) \int \phi_b^*(\xi')\, e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')}$$

$$V(\vec{r}',\xi')\,\psi_a^{\pm}(\vec{r}',\xi')\, d\vec{r}'\, d\xi'\, d\vec{k} \qquad (15)$$

le symbole $\sum$ indique que l'on somme sur les états liés et continus b du système A.

Substituons l'expression (15) dans les équations (8), les $\Phi_{b,k}(\vec{r},\xi)$ étant fonctions propres de $\hat{H}_o$ il vient :

$$\psi_a^{\pm}(\vec{r},\xi) = \Phi_a(\vec{r},\xi) + \lim_{\eta \to 0^+} \frac{2\mu}{(2\pi)^3 \hbar^2} \sum_b \phi_b(\xi) \int \phi_b^*(\xi') \frac{e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')}}{k_b^2 - k^2 \pm i\eta} V(\vec{r}',\xi') \psi_a^{\pm}(\vec{r}',\xi') \, d\vec{r}' \, d\xi' \, d\vec{k} \qquad (16)$$

La relation (16) n'est autre que la forme intégrale de l'équation inhomogène (4). La somme se fait sur toutes les voies ouvertes et fermées, mais seules les voies ouvertes ont un intérêt dans la détermination de la section efficace.

Le calcul de l'intégrale relative à la variable $\vec{k}$ nous donne /8/ :

$$G_{k_b}^{\pm}(\vec{r},\vec{r}') = \text{Limite}_{\eta \to 0} \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')}}{k_b^2 - k^2 \pm i\eta} dk = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik_b|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \qquad (17)$$

La fonction d'onde s'écrit :

$$\psi_a^{\pm}(\vec{r},\xi) = \Phi_a(\vec{r},\xi) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \sum_b \phi_b(\xi) \int \phi_b^*(\xi') \frac{e^{\pm ik_b|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}',\xi') \psi_a^{\pm}(\vec{r}',\xi') \, d\vec{r}' \, d\xi' \qquad (18)$$

$G_{k_b}^{\pm}(\vec{r},\vec{r}')$ est la fonction de Green de la particule libre. La fonction d'onde $\psi_a^{\pm}(\vec{r},\xi)$, compte tenu du fait que lorsque $\vec{r}'$ est grand l'intéraction est nulle, à la forme asymptotique suivante

$$\psi_a^{\pm}(\vec{r},\xi) \underset{r \to \infty}{\to} \phi_a(\xi) e^{i\vec{k}_a \vec{r}} + \sum_b \phi_b(\xi) f_{ab}^{\pm}(\vec{\Omega}) \frac{e^{\pm ik_b r}}{r} \qquad (19a)$$

avec :

$$f_{ab}^{\pm}(\vec{\Omega}) = \frac{-\mu}{2\pi\hbar^2} \int \phi_b^*(\xi') e^{\mp i\vec{k}_b \vec{r}'} V(\vec{r}',\xi') \psi_a^{\pm}(\vec{r}',\xi') \, d\vec{r}' \, d\xi' \qquad (19b)$$

$\vec{k}_b$ étant le vecteur d'onde dans la direction du flux diffusé caractérisé par $\vec{\Omega}(\theta, \phi)$ θ et ϕ étant les angles de la direction de diffusion.

Le terme $f^{\pm}_{ab}$ correspondant à la transition du système A de l'état $\phi_a(\xi)$ a un état $\phi_b(\xi)$ est appelé "amplitude de diffusion".

L'équation (19a) montre la différence de comportement asymptotique entre les solutions ψ_a^+ et ψ_a^- qui sont superposition d'une onde entrante non perturbée et, soit d'une onde sphérique entrante pour ψ_a^-, soit sortante pour ψ_a^+.

Seule la solution ψ_a^+, qui représente une onde diffusée sphérique émergeant du système A, possède une signification physique à laquelle est reliée la section efficace. Cependant, nous verrons ultérieurement que la solution ψ_a^- joue un rôle dans le cas où elle représente un état final.

3) Section efficace différentielle des chocs élastiques et inélastiques -

Pour obtenir la section efficace correspondant à la transition a → b, il faut mettre en évidence, dans la forme asymptotique (19a), la fonction d'onde relative au flux diffusé. Pour cela, multiplions par $\phi_b^*(\xi)$ cette forme asymptotique et intégrons sur toutes les valeurs des variables internes ξ ; le flux diffusé est représenté par la fonction d'onde.

$$F_{ab}(\vec{r}) = \begin{cases} e^{i\vec{k}_a\vec{r}} + f_{aa}(\vec{\Omega})\dfrac{e^{ik_a r}}{r} & \text{si } a = b \text{ cas du choc élastique} \quad (20a) \\[2ex] f_{ab}(\vec{\Omega})\dfrac{e^{ik_b r}}{r} & \text{si } a \neq b \text{ cas de choc inélastique} \quad (20b) \end{cases}$$

Le nombre de particules diffusées par unité de temps dans l'angle solide $d\Omega$ entourant $\vec{k}_b$ a pour valeur

$$\frac{\hbar k_b}{\mu} \left| f_{ab}(\vec{\Omega}) \right|^2 d\Omega \qquad (20c)$$

La section efficace différentielle de la transition a → b s'écrit :

$$d\sigma_{a\to b} = \frac{k_b}{k_a} \, | f_{ab} (\vec{\Omega}) |^2 d\Omega$$

avec $f_{ab}(\vec{\Omega})$ donnée par la relation (19b)

soit :

$$d\sigma_{a\to b} = \frac{\mu^2 k_b}{(2\pi \hbar^2)^2 k_a} \; |<\Phi_b \, | \hat{V} | \, \psi_a^{+}>|^2 \; d\Omega \qquad (21)$$

($\Phi_b = \Phi_{b,k_b}$ représente un état propre de l'hamiltonien $\hat{H}_o$)

4) Autres expressions de l'amplitude de transition : Opérateur transition -

Puisque $\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{V}$, l'identité suivante * :

$$\frac{1}{E - \hat{H} \pm i\epsilon} = \frac{1}{E - \hat{H}_o \pm i\epsilon} + \frac{1}{E - \hat{H} \pm i\epsilon} \, \hat{V} \, \frac{1}{E - \hat{H}_o \pm i\epsilon} \qquad (22)$$

permet d'écrire les équations de Lippmann-Schwinger (8) sous la forme :

$$\psi_a^{\pm} = \Phi_a + \frac{1}{E - \hat{H} \pm i\epsilon} \, \hat{V} \, \Phi_a \qquad (23)$$

En posant $\hat{\Omega}_a^{\pm} = 1 + \frac{1}{E - \hat{H} \pm i\epsilon} \, \hat{V}$ on a :

$$\psi_a^{\pm} = \hat{\Omega}^{\pm} \Phi_a \qquad (24)$$

* Quand le terme ϵ apparaît dans ces expréssions, le passage à la limite $\epsilon \to o$ est sous entendu.

L'équation (24) est importante car elle montre que l'application des opérateurs $\hat{\Omega}^{\pm}$ transforme un état arbitraire Φ_a du problème non perturbé en l'état correspondant $\psi_a^{\pm}$ du problème perturbé.

Il en résulte que :

$$\hat{V}\psi_a^{+} = \hat{V}\hat{\Omega}^{+}\Phi_a = \hat{T}\Phi_a \qquad (25)$$

en posant $\hat{T} = \hat{V}\hat{\Omega}^{+} = \hat{V} + \hat{V}\dfrac{1}{E-\hat{H}+i\epsilon}\hat{V}$ (26)

L'opérateur $\hat{T}$ défini par (26) est appelé "opérateur transition"; il est tel que :

$$T_{ab} = \langle \Phi_b | \hat{T} | \Phi_a \rangle \equiv \langle \Phi_b | \hat{V} | \psi_a^{+} \rangle \qquad (27)$$

En explicitant $\hat{T}$ nous avons :

$$\langle \Phi_b | \hat{T} | \Phi_a \rangle = \langle \Phi_b | \left(1 + \hat{V}\frac{1}{E-\hat{H}+i\epsilon}\right)\hat{V} | \Phi_a \rangle \qquad (28)$$

$\hat{V}$ et $\hat{H}$ étant deux opérateurs hermitiens, l'expression (28) se met encore sous la forme : ($\hat{V}$ réel)

$$\langle \Phi_b | \hat{T} | \Phi_a \rangle = \langle \psi_b^{-} | \hat{V} | \Phi_a \rangle \qquad (29)$$

avec :

$$\psi_b^{-} = \Phi_b + \frac{1}{E-\hat{H}-i\epsilon}\hat{V}\Phi_b \qquad (30)$$

En comparant les équations (23) et (30) on constate que ψ_b^{-} est solution du problème stationnaire perturbé mais avec, comme comportement asymptotique, une superposition d'une onde non perturbée représentant l'état final et d'une onde sphérique entrante.

La section efficace totale s'écrit alors :

$$\sigma_{ab} = \frac{\mu^2 k_b}{(2\pi\hbar^2)^2 k_a} \int |T_{ab}|^2 \, d\Omega \qquad (31)$$

T_{ab} pouvant avoir les expressions suivantes :

$$<\Phi_b | \hat{T} | \Phi_a > \equiv <\Phi_b | \hat{V} | \psi_a^+ > \equiv < \psi_b^- | \hat{V} | \Phi_a > \qquad (32)$$

Ces expressions, qui sont identiques si les fonctions ψ_a^+ et ψ_b^- sont des solutions exactes du problème stationnaire perturbé, peuvent diverger si des fonctions approchées sont utilisées. Dans la suite, nous appelerons `` approximation Prior '' l'expression $<\Phi_b | \hat{V} | \psi_a^+ >$ et `` approximation Post '' l'expression $< \psi_b^- | \hat{V} | \Phi_a >$.

II – ETUDE DES COLLISIONS AVEC REARRANGEMENT A+B → C+D CAS DE L'ECHANGE

L'étude des collisions avec réarrangement, et plus particulièrement le cas de l'échange au cours de chocs électron-atome, a fait l'objet de nombreux travaux parmi lesquels on peut citer les références /9/ /10/ /11/ /12/ /13/ /14/. Dans la suite, nous utiliserons la méthode développée par Lippmann /15/ qui est plus concise et plus générale que les précédentes.

1) Expression du vecteur d'état dans la base du système final –

L'état stationnaire $\psi_{a'}^{\pm}$ donnée par la relation (8), est une forme appropriée pour l'étude des collisions directes mais il décrit également tous les phénomènes de collisions possibles. ($\psi_a^{\pm}$ est une fonction propre de l'hamiltonien total donc est solution du problème général des collisions). Cependant, si nous considérons un réarrangement donné, il est préférable d'exprimer l'état diffusé dans la base du système final $\Phi'_{b,k}$ constitué par les fonctions propres de $\hat{H}'_o$; pour cela, transformons l'équation intégrale (8) en faisant apparaître les opérateurs relatifs au système après la collision.

En tenant compte de l'équation (3), on a l'identité suivante :

$$\frac{1}{E_a - \hat{H}_o \pm i\epsilon} = \frac{1}{E_a - \hat{H}'_o \pm i\epsilon} + \frac{1}{E_a - \hat{H}'_o \pm i\epsilon} (\hat{V}' - \hat{V}) \frac{1}{E_a - \hat{H}_o \pm i\epsilon}$$

permettant d'écrire l'équation (8) sous la forme :

$$\psi_a^{\pm} = \frac{E_a - \hat{H}_o \pm i\epsilon}{E_a - \hat{H}'_o \pm i\epsilon} \Phi_a + \frac{1}{E_a - \hat{H}'_o \pm i\epsilon} \hat{V}' \psi_a^{\pm}$$

ce qui devient, en tenant compte du fait que Φ_a est fonction propre de $\hat{H}_o$

$$\psi_a^{\pm} = \frac{\pm i\epsilon}{E_a - \hat{H}'_o \pm i\epsilon} \Phi_a + \frac{1}{E_a - \hat{H}'_o \pm i\epsilon} \hat{V}' \psi_a^{\pm} \qquad (33)$$

2) Comportement asymptotique des solutions $\psi_a^{\pm}$ -

Représentons $\psi_a^{\pm}$ dans la base complète Φ'_{bk} des vecteurs propres de $\hat{H}'_o$ (b correspondant à des états liés ou non) *

$$\psi_a^{\pm}(\vec{\rho},\eta) = \underset{\epsilon \to +0}{\text{Limite}} \left[\mathop{S}_b \int \frac{\pm i\epsilon}{E_a - E'_{bk} \pm i\epsilon} \Phi'_{bk}(\vec{\rho},\eta) \Phi'^{*}_{bk}(\vec{\rho}',\eta') \Phi_a(\vec{\rho}',\eta') d\vec{\rho}' d\eta' d\vec{k} + \right.$$

$$\left. \mathop{S}_b \int \frac{\Phi'_{bk}(\vec{\rho},\eta)}{E_a - E'_{bk} \pm i\epsilon} \Phi'^{*}_{bk}(\vec{\rho}',\eta') \hat{V}'(\vec{\rho}',\eta') \psi_a^{\pm}(\vec{\rho}',\eta') d\vec{\rho}' d\eta' d\vec{k} \right] \qquad (34)$$

* ici $\vec{\rho}$ et η sont les variables après le choc.

Lippmann a montré /(15) p. 266/ que le premier terme de l'équation (34) est nul à moins que l'intégrale double ne renferme une fonction de Dirac relative à l'énergie, ce qui interdit à une particule de passer d'un état libre à un état lié ou inversement. Dans l'étude de l'échange, lors d'un choc électron-atome d'Hydrogène, l'électron atomique passant dans le continuum il en résulte que le premier terme est nul. Il ne reste donc, dans la relation (34), qu'une expression qui est analogue au deuxième terme de l'équation (16). Un même développement conduit à une forme asymptotique analogue à celle donnée par la relation (19a) pour la partie sphérique, la partie plane n'existant plus ici.

L'amplitude de diffusion a pour expression :

$$g_{ab}^{\pm}(\vec{\Omega}) = \frac{-\mu'}{2\pi\hbar^2} < \Phi'_b \,|\, \hat{V}' \,|\, \psi_a^{\pm} > \qquad (35)$$

(Φ'_b est un état propre de l'hamiltonien $\hat{H}'_o$)

3) Section efficace différentielle –

Le flux diffusé correspondant à une transition a → b par unité d'angle solide est :

$$\frac{\hbar k_b}{\mu'} \left| g_{ab}(\vec{\Omega}) \right|^2 d\Omega \qquad (36)$$

μ' étant la masse réduite des particules après le choc.

La section efficace différentielle a pour expression :

$$d\sigma_{a \to b} = \frac{\mu\mu' k_b}{k_a (2\pi\hbar^2)^2} \left| <\Phi'_b \,|\, \hat{V}' \,|\, \psi_a^{+} > \right|^2 d\Omega \qquad (37)$$

μ étant la masse réduite des particules avant le choc.

4) Autres relations donnant l'amplitude de transition — Expressions "PRIOR" et "POST" (16) -

En exprimant ψ_a^+ dans le système initial donné par la relation (23), nous avons :

$$<\Phi'_b|\hat{V}'|\psi_a^+> \equiv <\Phi'_b|\hat{V}'|\Phi_a> + <\Phi'_b|\hat{V}' \frac{1}{E-\hat{H}+i\epsilon}\hat{V}|\Phi_a> \qquad (38)$$

Le second terme est symétrique par rapport au potentiel d'interaction avant et après le choc mais le premier terme ne s'exprime qu'en fonction de l'interaction après le choc.

Transformons ce premier terme : en tenant compte de (3) nous pouvons écrire :

$$\hat{V}' = \frac{1}{2}(\hat{V}' + \hat{V}) + \frac{1}{2}(E - \hat{H}'_o) - \frac{1}{2}(E - \hat{H}_o) \qquad (39)$$

Pour un état stationnaire $E = E_a = E_b$, on a :

$$<\Phi'_b|E - \hat{H}'_o|\Phi_a> \equiv <\Phi'_b|E - \hat{H}_o|\Phi_a> \equiv 0 \qquad (40)$$

puisque Φ_a est fonction propre de $\hat{H}_o$, Φ'_b de $\hat{H}'_o$, opérateurs hermitiens.

Finalement :

$$<\Phi'_b|\hat{V}'|\Phi_a> \equiv \frac{1}{2}<\Phi'_b|\hat{V} + \hat{V}'|\Phi_a> \equiv <\Phi'_b|\hat{V}|\Phi_a> \qquad (41)$$

Les opérateurs $\hat{V}$ et $\hat{V}'$ jouent donc le même rôle par rapport aux états initiaux et finaux non perturbés.

L'expression (38) s'écrit alors :

$$<\Phi'_b|\hat{V}'|\psi_a^+> = <\Phi'_b|(1 + \hat{V}' \frac{1}{E-\hat{H}+i\epsilon})\hat{V}|\Phi_a> \qquad (42)$$

Nous obtenons l'identité suivante :

$$T_{ab} \equiv \langle \Phi'_b | \hat{V}' | \psi_a^+ \rangle \equiv \langle \psi_b^{-\prime} | \hat{V} | \Phi_a \rangle \qquad (43)$$

avec

$$\psi_b^{-\prime} = \Phi'_b + \frac{1}{E - \hat{H} - i\epsilon} \hat{V}' \Phi'_b = \Phi'_b + \frac{1}{E - \hat{H}'_0 - i\epsilon} \hat{V}' \psi_b^{-\prime} \qquad (44)$$

L'identité (43) montre que la section efficace différentielle peut être déterminée soit avec ψ_a^+, soit avec $\psi_b^{-\prime}$; ces états sont deux solutions du problème stationnaire perturbé ayant des comportements asymptotiques différents :

ψ_a^+ est une superposition d'une onde non perturbée initiale et d'une onde sphérique sortante.

$\psi_b^{-\prime}$ est une superposition d'une onde non perturbée finale et d'une onde sphérique entrante.

La section efficace d'excitation s'écrit :

$$\sigma_{ab} = \frac{\mu \mu' k_b}{k_a (2\pi\hbar^2)^2} \int |T_{ab}|^2 \, d\Omega \qquad (45)$$

avec T_{ab} donnée par l'une ou l'autre des expressions (43) lesquelles sont identiques si, et seulement si, les solutions ψ_a^+ et $\psi_b^{-\prime}$ sont exactes. Cependant, on ne sait pas résoudre exactement l'équation des états stationnaires (4), même dans le cas le plus simple du choc électron-atome d'Hydrogène, ce qui nécessite l'utilisation de solutions approchées. Il en résulte que ces deux expressions, que nous appelerons encore : la première `` Approximation Prior '' et la seconde `` Approximation Post '', ne sont plus identiques. Dans le cas d'une divergence appréciable, la théorie formelle ne permet pas de faire un choix entre ces deux expressions, ce qui conduit à rejeter les solutions approchées, à moins que des raisons théoriques précises, concernant les approximations nécessitées par les calculs, entrent en considération.

D'autre part, l'identité de ces deux expressions n'implique pas nécessairement que la solution approximée est valable car elle peut résulter d'une symétrie entre état initial et final dans l'élément de matrice, ce qui est par exemple le cas dans la méthode de Born qui fournit cependant, aux basses énergies, des résultats en désaccord avec les mesures expérimentales.

B) CAS DU CHOC ELECTRON – ATOME D'HYDROGENE SECTION EFFICACE TOTALE D'EXCITATION

Dans cette partie les résultats formels précédents sont appliqués au cas d'une collision entre un électron et un atome d'Hydrodène, lequel constitue l'objet de ce travail.

I – SECTION EFFICACE D'EXCITATION DIRECTE

Supposons, pour commencer, que la probabilité d'échange entre l'électron incident et l'électron atomique est négligeable. La section efficace d'excitation de l'atome d'Hydrogène, depuis son état initial (noté O) jusqu'à un état excité (noté n), s'écrit, d'après les relations (31) et (32) en utilisant le système d'unités atomiques :

$$\sigma^{d}_{on} = \frac{k_n}{4\pi^2 k_o} \int \left| T^{d}_{on} \right|^2 d\Omega \qquad \text{avec (46)}$$

$$T^{d}_{on} < \phi_n(\vec{r}_1)\, e^{i\vec{k}_n\vec{r}_2} \,|\hat{V}|\, \psi^{+}_{o}(\vec{r}_1,\vec{r}_2) > \qquad (47a)$$

$$\equiv < \psi^{-}_{n}(\vec{r}_1,\vec{r}_2) \,|\hat{V}|\, \phi_o(\vec{r}_1)\, e^{i\vec{k}_o\vec{r}_2} > \qquad (47b)$$

L'indice ``d'' rappelle que la collision est directe, les indices 1 et 2 caractérisent respectivement l'électron atomique et l'électron diffusé , $\vec{k}_o$ et $\vec{k}_n$ sont les moments des électrons incident et diffusé , $\phi_o(\vec{r}_1)$ et $\phi_n(\vec{r}_1)$ représentent les états initial et final de l'atome d'Hydrogène, $\psi^{+}_{o}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ et $\psi^{-}_{n}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ sont les solutions de l'équation des états stationnaires (4) avec :

$$\hat{H}_o = -\frac{1}{2}\nabla^2_1 - \frac{1}{2}\nabla^2_2 - \frac{1}{r_1} \qquad (48)$$

$$\hat{V} = \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} - \frac{1}{r_2} \qquad (49)$$

$$E_a = \epsilon_o + \frac{k_o^2}{2} = \epsilon_n + \frac{k_n^2}{2} \qquad (50)$$

Les comportements asymptotiques des solutions ψ_o^+ et ψ_n^-, donnés par les relations (19a) et (19b), s'écrivent :

$$\psi_o^+ (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \xrightarrow[r_2 \to \infty]{} \phi_o (\vec{r}_1)\, e^{i\vec{k}_o \vec{r}_2} + \sum_j \phi_j (\vec{r}_1)\, f_{oj}^+ (\vec{\Omega})\, e \frac{i k_j r_2}{r_2} \qquad (51a)$$

$$\psi_n^- (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \xrightarrow[r_2 \to \infty]{} \phi_n (\vec{r}_1)\, e^{i\vec{k}_n \vec{r}_2} + \sum_j \phi_j (\vec{r}_1)\, f_{nj}^- (\vec{\Omega})\, e \frac{-i k_j r_2}{r_2} \qquad (51b)$$

II – SECTION EFFICACE D'EXCITATION ET D'ECHANGE

Considérons le cas où l'électron incident 2 vient se placer sur une orbitale atomique lors du choc alors que l'électron atomique 1 se trouve diffusé, nous avons une collision avec réarrangement ; la section efficace, donnée par la relation (45), s'écrit :

$$\sigma_{on}^e = \frac{k_b}{4\pi^2 k_o} \int |T_{on}^e|^2 \, d\Omega \qquad (52)$$

L'indice e rappelle qu'il y a échange. Dans ce cas, on a :

$$T_{on}^e = < \phi_n (\vec{r}_2)\, e^{i\vec{k}_n \vec{r}_1} \, |\hat{V}'| \, \psi_o^+ (\vec{r}_1, \vec{r}_2) > \qquad (53a)$$

$$\equiv < \psi_n^- (\vec{r}_2, \vec{r}_1) \, |\hat{V}| \, \phi_o (\vec{r}_1)\, e^{i\vec{k}_o \vec{r}_2} > \qquad (53b)$$

$\hat{V}$ est donné par la relation (49) et $\hat{V}' = \dfrac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} - \dfrac{1}{r_1}$ (54)

III – SECTION EFFICACE TOTALE D'EXCITATION

Le système est composé de deux particules identiques de spin 1/2 ; pour satisfaire au principe de Pauli, la fonction d'onde totale doit être antisymétrique par permutation des deux électrons, donc dans l'état de singulet la fonction d'onde $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ s'écrit :

$$\psi_S = \psi_o^+ (\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \psi_o^+ (\vec{r}_2, \vec{r}_1) \qquad (55)$$

La section efficace différentielle correspondant à cet état est :

$$d\sigma_S = \frac{k_n}{4\pi^2 k_o} \left| T^d_{on} + T^e_{on} \right|^2 d\Omega \qquad (56)$$

Dans l'état de triplet, la fonction d'onde $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ a pour expression :

$$\psi_t = \psi_o^+(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - \psi_o^+(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \qquad (57)$$

avec, pour section efficace différentielle correspondante :

$$d\sigma_t = \frac{k_n}{4\pi^2 k_o} \left| T^d_{on} - T^e_{on} \right|^2 d\Omega \qquad (58)$$

Si nous supposons que le flux des particules incidentes est non polarisé, tous les états de spin sont également probables ce qui nous donne, pour la section efficace d'excitation différentielle, l'expression :

$$d\sigma = \frac{1}{4} d\sigma_S + \frac{3}{4} d\sigma_t \qquad (59)$$

La section efficace totale d'excitation a pour valeur :

$$\sigma_{o \to n} = \frac{k_n}{4\pi^2 k_o} \int \left(\frac{1}{4} \left| T^d_{on} + T^e_{on} \right|^2 + \frac{3}{4} \left| T^d_{on} - T^e_{on} \right|^2 \right) d\Omega \qquad (60)$$

avec T^d_{on} et T^e_{on} donnés par les relations (47) et (53) sous la forme (a) ou (b).

IV – SECTION EFFICACE D'IONISATION

Si l'énergie de l'électron incident est suffisante pour ioniser l'atome, l'électron atomique est éjecté, avec un vecteur d'onde $\vec{k}$, et la section efficace est obtenue par une intégration supplémentaire relative à tous les états finaux possibles de cet électron, les calculs sont détaillés dans la troisième partie.

C) APERCU SUR LES PRINCIPAUX RESULTATS THEORIQUES ET EXPERIMENTAUX ACTUELS CONCERNANT LA SECTION EFFICACE DE CHOC ELECTRON - ATOME D'HYDROGENE

De très nombreux travaux, tant théoriques qu'expérimentaux, ont été effectués ces dernières années sur le processus d'intéraction électron-atome (excitation, ionisation, recombinaison etc...) et, plus particulièrement, sur le plus simple d'entre eux : l'atome d'Hydrogène. Les principaux résultats théoriques et expérimentaux sont exposés dans plusieurs mémoires dont les principaux sont les suivants :
Bates /17/, Burke et Schmith /18/, Moiseiwitch et Smith /19/, Rudge et Seaton /20/, Ya Veldre Damburg et Peterkof /21/, Mc. Dowell /22/, Bates et Estermann /23/, sans compter de nombreux ouvrages plus spécialisés cités dans les références des publications et livres précédents.

I – ASPECTS THEORIQUES

Les mesures expérimentales des sections efficaces étant peu nombreuses, même dans les cas les plus simples, les travaux théoriques sont très importants puisqu'ils permettent d'approximer les valeurs qu'il faut utiliser dans de multiples applications.

La principale difficulté provient du fait que, même si le noyau est supposé fixe lors du choc électron-atome d'Hydrogène, on est en présence d'un problème à trois corps que l'on ne sait pas résoudre analytiquement. Il est donc nécessaire d'introduire certaines approximations, plusieurs voies étant possibles, aussi allons-nous examiner brièvement les principales d'entre elles.

La solution de l'équation de Schrödinger (4), en tenant compte de (48), (49) et (50), peut être développée dans la base des états atomiques ϕ_n non perturbés, soit :

$$\psi_o^+(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \sum_n \phi_n(\vec{r}_1)\ F_n(\vec{r}_2) \pm \phi_n(\vec{r}_2)\ F_n(\vec{r}_1) \qquad (61)$$

la somme $\sum$ est faite sur les états discontinus et continus de l'atome, ce qui conduit à un système infini d'équations intégro-différentielles dont les fonctions $F_n(\vec{r})$ sont solutions :

a) Méthode "close - coupling"

Dans cette méthode, on considère un nombre fini de termes dans le développement (61), ce nombre étant peu élevé par suite de l'importance des calculs, l'ordre de l'approximation dépend du nombre d'états pris en considération.

Les résultats des sections efficaces d'excitation 1s→2s et 1s→2p obtenus en considérant deux états (/24/ à /26/) ; trois états 1s–2s–2p (/27/ – /28/), six états 1s–2s–2p–3s–3p–3d /29/, montrent une très lente convergence ; les valeurs obtenues ne sont significatives que pour des énergies inférieures à l'énergie d'excitation du plus bas état atomique exclu du développement : par exemple, en considérant six états, on ne peut obtenir les sections efficaces que pour des énergies inférieures à 12,5 eV /30/ et /31/.

b) Méthode des ondes distordues -

C'est une simplification de la méthode "Close-coupling" à deux états. L'hypothèse consiste à supposer que, dans la première équation intégro différentielle, le couplage entre l'état initial et l'état final est négligeable. De nombreux calculs ont été faits en utilisant cette méthode [/32/ à /35/]: la section efficace d'excitation 1s → 2p est en meilleur accord avec les résultats expérimentaux que dans la méthode "close-coupling", mais la divergence est grande dans les autres cas.

c) Méthode de Born -

C'est la plus simple des approximations puisqu'elle ne tient compte, dans le développement (61), que d'un seul terme, l'onde relative à l'électron incident étant supposée plane et l'échange négligeable, soit :

$$\psi_o^+(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = e^{i\vec{k}_o\vec{r}_2}\ \phi_o(\vec{r}_1) \qquad (62)$$

L'amplitude de transition est alors :

$$T^B_{on} = \left\langle \phi_n(\vec{r}_1)\ e^{i\vec{k}_n\vec{r}_2} \left| \frac{1}{|\vec{r}_2-\vec{r}_1|} - \frac{1}{\vec{r}_2} \right| \phi_o(\vec{r}_1)\ e^{i\vec{k}_o\vec{r}_2} \right\rangle \qquad (63)$$

Le terme dû à l'interaction électron-proton s'annule par suite de l'orthogonalité des fonctions d'onde.

En posant $\vec{q} = \vec{k}_o - \vec{k}_n$ et en utilisant l'intégrale de Bethe /36/ :

$$\int \frac{e^{i\vec{q}\vec{r}_2}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d\tau_2 = \frac{4\pi}{q^2} e^{i\vec{q}\vec{r}_1} \qquad (64a)$$

on obtient :

$$T^B_{on} = \frac{4\pi}{q^2} G_{on}(\vec{q}) \qquad (64b)$$

avec :

$$G_{on}(\vec{q}) = \int \phi^*_n(\vec{r}_1)\, e^{i\vec{q}\vec{r}_1}\, \phi_o(\vec{r}_1)\, d\tau_1 \qquad (64c)$$

La section efficace d'excitation, dans l'approximation de Born, a pour expression :

$$\sigma^B_{on} = \frac{4k_n}{k_o} \int \frac{|G_{on}(q)|^2}{q^4} d\Omega \qquad (65)$$

Si $\vec{q}$ est choisi comme axe polaire des fonctions d'onde atomiques, (65) s'écrit :

$$\sigma^B_{on} = \frac{8\pi}{k_o^2} \int_{|k_o - k_n|}^{k_o + k_n} \frac{|G_{on}(q)|^2}{q^3} dq \qquad (66)$$

Nous calculerons, dans la suite, $G_{on}(q)$ analytiquement pour plusieurs transitions et nous déterminerons σ^B_{on} numériquement, les courbes correspondantes étant représentées graphiquement.

Cette méthode a fait l'objet de nombreux travaux théoriques et numériques /37/ à /40/. Elle donne des résultats en bon accord avec les mesures expérimentales pour des énergies supérieures ou égales à une dizaine de fois l'énergie du seuil d'excitation. Pour des énergies inférieures, les résultats sont deux à trois fois trop élevés, le maximum étant déplacé, cependant cette méthode sert de référence pour normaliser les résultats expérimentaux correspondant à des énergies supérieures à 200 électrons volts, Par ailleurs, elle sert de point de comparaison pour les théories nouvelles donnant les sections efficaces à basse énergie, lesquelles doivent tendre vers celles de cette méthode pour des énergies plus élevées.

L'introduction du terme d'échange (approximation de Born et Oppenheimer /41/ à /43/) accroît fortement les valeurs des sections efficaces aux faibles énergies, et le théorème de conservation de Bohr, Peierls et Placzek /7/ n'est plus respecté. Dans cette méthode, Ockur /44/ modifie l'amplitude d'échange, les résultats obtenus pour l'excitation $1s \rightarrow 2s$ et $1s \rightarrow 2p$ sont peu différents de ceux pour lesquels l'échange est négligé /45/.

Les approximations précédentes, basées sur une décomposition de la fonction d'onde amenant la séparation des variables, ne donnent des résultats satisfaisants que pour les très basses énergies (<12 eV). Elles permettent de mettre en évidence les résonances mais ne sont pas satisfaisantes pour la détermination des sections efficaces inélastiques correspondant à des énergies comprises entre 12 eV et 200 eV. (Au-dessus de 200 eV, l'approximation de Born est satisfaisante) car le nombre d'états qui devrait être retenu dans le développement pour ce domaine d'énergie est tel que les calculs numériques deviennent insurmontables. Il est donc nécessaire de rechercher d'autres formes de fonctions d'onde.

Deux autres approximations tiennent compte, dans la forme de la fonction d'onde, de la répulsion entre les électrons, ce sont les suivantes :

d) Méthode d'impulsion -

Elle a été introduite par Chew /46/ pour étudier la diffusion à haute énergie neutron - deuteron et a été appliquée au choc électron - atome d'Hydrogène par Akerib et Borowitz /47/. Elle revient à considérer que, lors du choc, la configuration atomique est figée : cette hypothèse ne peut être valable que si l'électron incident ne se trouve que pendant un temps très court dans le champ de l'atome, ce qui exige des chocs à hautes énergies. Les valeurs obtenues par ces auteurs, pour la section efficace $1s \rightarrow 2p$, sont en bon accord avec les résultats expérimentaux mais ce travail a été remis en question par Coleman et Mc. Dowell /48/ qui renormalisent

correctement la fonction d'onde et obtiennent des valeurs beaucoup plus élevées que celles données par la méthode de Born. Les effets d'échange ont été introduits mais ils corrigent très peu les résultats /49/.

e) Méthode de Vainshtein - Presnyakov - Sobelman - (encore appelée, par abréviation, méthode VPS). Elle consiste à choisir une fonction d'onde de la forme :

$$\psi_o^+ (\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \phi_o(\vec{r}_1)\ g(\vec{r}_1,\vec{r}_2) \qquad (67)$$

Elle présente l'avantage, par l'intermédiaire du terme $g(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$, de tenir compte de l'interaction électron-électron. Nous y reviendrons dans la deuxième partie puisque c'est la modification de cette méthode qui fait, en partie, l'objet de ce travail.

II – RESULTATS EXPERIMENTAUX

Pour la variation de la section efficace d'excitation par choc électron-atome d'Hydrogène, en fonction de l'énergie des électrons incidents, les principaux résultats expérimentaux ne concernent que les transitions 1s → 2s et 1s → 2p. Ces mesures doivent être suffisamment précises sur les systèmes les plus simples pour permettre de vérifier les théories approximées. Cependant, les principales difficultés sont les suivantes : il faut que le système étudié soit isolé, c'est-à-dire que les résultats ne doivent pas dépendre de la pression (il faut en particulier éviter les transferts d'excitation par collision) : par ailleurs, l'ensemble expérimental ne doit pas subir d'influences extérieures telles que celles de champs électromagnétiques macroscopiques. Il faut également éviter les impuretés. De plus, l'Hydrogène n'étant pas monoatomique à la température ordinaire,la moléculte doit être dissociée ce qui créé des ions, des électrons libres et des états excités de l'atome. Enfin, au cours de l'excitations 1s → 2s ou 1s → 2p, certains atomes se trouvent dans des états $n<2$ ce qui donne des phénomènes de desexcitation en cascade [/17/pages 443 à 452] .

Les principales méthodes expérimentales se divisent en trois grandes catégories :

1)– étude des intensités spectrales lumineuses obtenues par choc électronique. Les mesures optiques ne peuvent généralement pas être directement comparées aux sections efficaces théoriques, surtout en raison des effets de cascade, de l'anisotropie du rayonnement et de la possibilité d'existence de plusieurs voies de desexcitation radiatives.Elles sont plus spécialement adaptées aux états excités à durée de vie très courte.

2)– Pour les états excités à vie plus longue, on utilise la desexcitation sur une cible métallique à bas potentiel d'ionisation ou sur un gaz intermédiaire. Il en résulte un spectre d'électrons secondaires qui est étudié. Dans ce cas, il faut connaître le rendement de transfert atome excité – électron secondaire, ce qui est toujours délicat.

3)– Enfin, dans la technique des faisceaux croisés, éventuellement modulés, on étudie la dispersion d'un faisceau monocinétique, laquelle est fonction de l'état d'excitation du gaz traversé. Dans ce cas, les résultats dépendent de l'angle d'observation et il faut intégrer sur toutes les directions.

Outre d'autres difficultés expérimentales comme, par exemple, la transparence des fenêtres ou la calibration des appareils, les valeurs doivent généralement être normalisées car les mesures absolues, quoique théoriquement possibles, sont difficilement réalisées. Pour cette normalisation, on utilise généralement la méthode d'approximation de Born qui, grâce à d'autres travaux, est considérée comme valable, principalement dans le cas e – H, pour des énergies d'électrons incidents supérieures à environ 200 eV.

Malgré toutes ces difficultés, les différentes valeurs expérimentales concernant $\sigma_{1s \to 2p}$ sont en bon accord. Elles sont dûes soit à Fite et Brackmann /50/, soit à Fite, Stebbings et Brackmann /51/ et, plus récemment, à Long, Cox et Smith /52/. Nous utiliserons ces résultats dans la suite.

Pour $\sigma_{1s \to 2s}$ non directement mesurable, il existe trois courbes de variations dûes soit à Lichten et Schultz /53/, soit à Stebbings, Fite, Hummer et Brackmann /54/ ou encore à Hils, Kleinpoppen et Koschmieder /55/. Dans tous les cas, les formes de courbes sont similaires (/19/ fig. 66 page 291) mais les mesures absolues sont différentes, soit par suite de normalisations effectuées à des énergies distinctes, soit pour des raisons de méthode mesure ; celle de Lichten et al. est normalisée sur la méthode de Born à 40 eV, ce qui semble peu justifié ; elle donne un maximum supérieur à celui de la méthode de Born. Comme la plupart des auteurs, nous nous référons aux résultats de Stebbings et al. et, sur la figure 13, les résultats de Hils et al. sont également indiqués.

Enfin, la section efficace d'ionisation a été mesurée par Fite et Brackmann /56/ et par Boyd et Boksenberg /57/. Les résultats sont en accord satisfaisant. L'avantage est que, dans le premier cas, la mesure est absolue ce qui justifie la validité de l'approximation de Born aux hautes énergies.

DEUXIEME PARTIE

ETUDE DES APPROXIMATIONS DANS LA METHODE DES CORRELATIONS. MODIFICATIONS ET FONCTIONS D'ONDES CORRESPONDANTES

Comme nous l'avons vu, il existe plusieurs méthodes théoriques permettant de déterminer les sections efficaces d'excitation et d'ionisation par choc électronique. Nous choisissons la forme de fonction d'onde (67) introduite par Vainshtein, Presnyakov et Sobelman /58/, qui a l'intérêt, par l'intermédiaire de $g(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, de tenir compte de l'interaction entre les électrons.

Nous montrerons que, moyennant différentes approximations, on peut retrouver soit la méthode de Born, soit la méthode VPS, soit les résultats de la méthode d'impulsion /59/, ce qui montre le caractère général de cette forme de fonction.

Dans cette partie, nous allons étudier l'importance des termes négligés dans les méthodes VPS et Born et nous déduirons une modification des fonctions d'ondes correspondantes.

I – POSITION DU PROBLEME

L'équation des états stationnaires (4), compte-tenu des relations (48) et (49), s'écrit :

$$\left(\frac{1}{2}\nabla_1^2 + \frac{1}{2}\nabla_2^2 + \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} - \frac{1}{\vec{r}_1 - \vec{r}} + E\right)\psi_j^{\pm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0 \qquad (68)$$

Dans la méthode choisie la fonction d'onde totale a pour expression (67) :

$$\psi_j^{\pm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_j(\vec{r}_1)\, g_j^{\pm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

où $\phi_j(\vec{r}_1)$ représente la fonction d'onde de l'atome d'hydrogène dans l'état j.

Dans l'approximation ``Prior '' j, correspondant à l'état initial de l'atome d'hydrogène, est noté o ; la fonction d'onde est $\psi_o^{\pm}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$, elle doit avoir le comportement asymptotique donné par la relation (51a).

Dans l'approximation ``Post '' j, correspondant à l'état final de l'atome d'hydrogène, est noté n ; la fonction d'onde est $\psi_n^{\pm}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$, elle doit avoir le comportement asymptotique donné par la relation (51b).

En substituant la fonction d'onde donnée par la relation (67) dans l'équation (68), nous obtenons l'équation exacte à laquelle doit satisfaire $g_j^{\pm}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ soit :

$$\left[\frac{1}{2}\nabla_1^2 + \frac{1}{2}\nabla_2^2 + \frac{1}{r_2} - \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} + \frac{k_j^2}{2} + \vec{\nabla}_1 \log \phi_j(\vec{r}_1).\vec{\nabla}_1\right] g_j^{\pm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0 \qquad (69)$$

Avec le changement de variables :

$$\vec{R} = \frac{1}{2}(\vec{r}_2 + \vec{r}_1) \quad ; \quad \vec{\rho} = \frac{1}{2}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) \qquad (70)$$

L'équation (69) se met sous la forme :

$$\left[\frac{1}{2}\nabla_R^2 + \frac{1}{2}\nabla_\rho^2 + \frac{2}{|\vec{R} + \vec{\rho}|} - \frac{1}{\rho} + k_j^2 + \vec{\nabla}_1 \log \phi_j(\vec{r}_1)\left(\vec{\nabla}_R \log g_j^{\pm} - \vec{\nabla}_\rho \log g_j^{\pm}\right)\right] g_j^{\pm}(\vec{R}, \vec{\rho}) = 0 \qquad (71)$$

L'équation exacte (71) n'est pas résoluble sous cette forme.

Dans les travaux antérieurs /58/, /60/ les hypothèses suivantes sont faites :

1) – le terme $A = \vec{\nabla}_1 \log \phi_j(\vec{r}_1)\left[\vec{\nabla}_R \log g_j^{\pm} - \vec{\nabla}_\rho \log g_j^{\pm}\right]$ (72) est néglige.

2) – dans le potentiel d'attraction, il est supposé que $\vec{R} \# \vec{\rho}$ ce qui est vérifié, sauf dans le cas où l'électron incident est très proche du noyau.

Dans cette partie, nous allons modifier la première hypothèse. Avant d'entreprendre cette étude, revenons aux travaux précédents à titre de comparaison.

Avec les deux approximations précédentes, l'équation (71) devient :

$$\left(\frac{1}{2}\nabla^2_R + \frac{1}{2}\nabla^2_\rho + \frac{1}{R} - \frac{1}{\rho} + k_j^2\right) g^{\pm}_{ja}(\vec{R},\vec{\rho}) = 0 \qquad (73)$$

Dans cette relation, les variables se séparent et une solution approchée $g^{\pm}_{ja}(\vec{R},\vec{\rho})$ peut être obtenue. De ces hypothèses, il résulte que le problème de collision décrit par $g^{\pm}_{ja}$ revient à considérer, d'une part, la diffusion mutuelle de deux électrons supposés libres (équation en ρ) et, d'autre part, le mouvement d'un électron soumis au champ du noyau (équation en R) dans le centre de masse.

Posons :

$$g^{\pm}_{ja}(\vec{R},\vec{\rho}) = \psi^{\pm}_{Rj}(\vec{R})\ \psi^{\pm}_{\rho j}(\vec{\rho}) \qquad (74)$$

$\psi^{\pm}_{Rj}$ et $\psi^{\pm}_{\rho j}$ sont, respectivement, les solutions des deux équations.

$$\left(\nabla^2_\rho + k_j^2 - \frac{2}{\rho}\right) \psi^{\pm}_{\rho j}(\vec{\rho}) = 0 \qquad (75a)$$

$$\left(\nabla^2_R + k_j^2 + \frac{2}{R}\right) \psi^{\pm}_{Rj}(\vec{R}) = 0 \qquad (75b)$$

(La séparation de $2k_j^2$ en deux parties est faite pour que $\psi_j(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ ait le comportement asymptotique exigé). Ainsi, le problème est réduit à la résolution d'équations de forme analytique :

$$\left(\nabla^2_r + k^2 - \frac{\delta}{r}\right) \psi^{\pm}_r(\vec{r}) = 0 \qquad (76)$$

dont les solutions sont : / 8 /

$$\psi(r) = e^{ikz}\ F\left(-\frac{i\delta}{2k}\ ;\ 1\ ;\ ikr - ikz\right) \qquad (77)$$

F étant la fonction hypergéométrique confluente

La forme asymptotique de cette fonction /61/ correspond bien à la superposition d'une onde plane et d'une onde sphérique sortante, ce qui satisfait aux conditions asymptotiques de l'approximation "Prior" qui peut donc s'écrire :

$$g_o^+ (\vec{R},\vec{\rho}) = N_o\, e^{i\vec{k}_o(\vec{R}+\vec{\rho})}\; F(-\frac{i}{k_o}\,;\,1\,;\,ik_o\rho - i\vec{k}_o\vec{\rho}).$$

$$F(+\frac{i}{k_o}\,;\,1\,;\,ik_oR - i\vec{k}_o\vec{R}) \qquad (78)$$

L'équation (76) étant invariante par changement du signe de k et de z, la fonction :

$$\psi(\vec{r}) = \varepsilon^{ikz}\; F(\frac{i\delta}{2k}\,;\,1\,;\,-ikr - ikz) \qquad (79)$$

est encore solution de cette équation.

Sa forme asymptotique est la superposition d'une onde plane et d'une onde sphérique entrante donc elle satisfait aux conditions (51b) de l'approximation "Post" qui peut s'écrire :

$$g_n^- (\vec{R},\vec{\rho}) = N_n\, e^{i\vec{k}_n(\vec{R}+\vec{\rho})}\; F(\frac{i}{k_n}\,;\,1\,;\,-ik_n\rho - i\vec{k}_n\vec{\rho}).$$

$$F(-\frac{i}{k_n}\,;\,1\,;\,-ik_nR - i\vec{k}_n\vec{R}) \qquad (80)$$

Les coefficients de normation N sont déterminés pour obtenir la forme asymptotique donnée par la relation (51a), l'amplitude de l'onde incidente étant égale à l'unité, soit :

$$N_j = \Gamma(1 - \frac{i}{k_j})\;\Gamma(1 + \frac{i}{k_j}) \qquad (81)$$

II – PREMIER MODIFICATION

1) Résolution de l'équation (71), le terme A n'étant plus négligé –

Le facteur A, dans l'équation (71), a pour expression dans l'approximation "Prior": $\vec{\nabla}_1 \log \phi_o(\vec{r}_1)\;(\vec{\nabla}_R \log g_j^{\pm} - \vec{\nabla}_\rho \log g_j^{\pm})$ et dans l'approximation "Post" : $\vec{\nabla}_1 \log \phi_n(\vec{r}_1)\;(\vec{\nabla}_R \log g_j^{\pm} - \vec{\nabla}_\rho \log g_j^{\pm})$ ce qui montre qu'il est différent dans les deux cas puisqu'il dépend de l'état de l'atome d'hydrogène (état initial dans "Prior" ; état final dans "Post").Ainsi négliger ce terme revient à chercher une solution $g_j^{\pm}(\vec{R},\vec{\rho})$ qui est indépendante de l'état atomique ; elle ne pourra donc décrire le phénomène de collision que d'une manière très approximative.

La première modification que nous proposons consiste à poser $\vec{\nabla}_1 \log \phi_j (\vec{r_1}) = \vec{C}_j$ où $\vec{C}_j$ est un vecteur supposé constant mais différent suivant l'état atomique considéré ; ainsi, par l'intermédiaire de ce terme $\vec{C}_j$, la solution $g_j^{\pm}(\vec{R},\vec{\rho})$ va dépendre de l'état atomique. L'équation (71), avec cette hypothèse et la seconde utilisée dans les théories précédentes, s'écrit :

$$\left[\frac{1}{2}\nabla^2_R + \frac{1}{2}\nabla^2_\rho + \frac{1}{R} - \frac{1}{\rho} + k_j^2 + \vec{C}_j \,.\, (\vec{\nabla}_R \log g_j^{\pm} - \vec{\nabla}_\rho \log g_j^{\pm})\right] g_j^{\pm}(\vec{R},\vec{\rho}) = 0 \quad (82)$$

L'équation (82) étant à variables séparées, on cherche une solution de la forme. :

$$g_j^{\pm}(\vec{R},\vec{\rho}) = \theta_j^{\pm}(\vec{R})\ \eta_j^{\pm}(\vec{\rho}) \qquad (83)$$

Pour simplifier les notations, posons $g_j^{\pm}(\vec{R},\vec{\rho}) = g(\vec{R},\vec{\rho})$; en faisant de même pour $\theta(\vec{R})$ et $\eta(\vec{\rho})$, ces fonctions doivent être respectivement solutions des équations :

$$(\nabla^2_R + 2\vec{C}_j \,.\, \vec{\nabla}_R + \frac{2}{R} + k_j^2)\ \theta(\vec{R}) = 0 \qquad (84a)$$

$$(\nabla^2_\rho - 2\vec{C}_j \,.\, \vec{\nabla}_\rho - \frac{2}{\rho} + k_j^2)\ \eta(\vec{\rho}) = 0 \qquad (84b)$$

que nous pouvons écrire, en posant $\psi = \theta(R)$ ou $\eta(\rho)$, compte tenu de leur symétrie :

$$\left[\sum_{i=1,2,3} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \pm 2 \sum_{i=1,2,3} C_{ji} \frac{\partial}{\partial x_i} \pm \frac{2}{r} + k_j^2)\right] \psi(\vec{r}) = 0 \qquad (85)$$

Le signe + correspond à l'équation en R et le signe - à l'équation en ρ. Cherchons une solution de la forme :

$$\psi(\vec{r}) = \phi_r(\vec{r})\ e^{\sum_i \lambda_i x_i} \qquad (86)$$

et déterminons la valeur que doit prendre le paramètre λ_i pour que les termes en $\frac{\partial \psi}{\partial x_i}$ s'annulent dans l'équation (85) : on obtient $\lambda_i = - C_{ij}$ pour l'équation en R et et $\lambda_i = C_{ij}$ pour l'équation en ρ. Il en résulte que :

$$\theta(\vec{R}) = \phi_R(\vec{R})_e^{-\sum_i C_{ij} X_i} \qquad (87a) \qquad \vec{R} = (X_i)$$

et

$$\eta(\vec{\rho}) = \phi_\rho(\vec{\rho})\ e^{\sum_i C_{ij} x_i} \qquad (87b) \qquad \vec{\rho} = (x_i)$$

En conservant l'hypothèse selon laquelle $\vec{R} \# \vec{\rho}$, il vient :

$$g_j^{\pm}(\vec{R},\vec{\rho}) = \phi_R(\vec{R})\ \phi_\rho(\vec{\rho}) \qquad (88)$$

Les fonctions $\phi_R(\vec{R})$ et $\phi_\rho(\vec{\rho})$ sont respectivement solutions des équations :

$$(\nabla_R^2 + \frac{2}{R} + K_j^2)\ \phi_R(\vec{R}) = 0 \qquad (89a)$$

et

$$(\nabla_\rho^2 - \frac{2}{\rho} + K_j^2)\ \phi_\rho(\vec{\rho}) = 0 \qquad (89b)$$

avec $$K_j^2 = k_j^2 - \sum_i C_{ij}^2 \qquad (89c)$$

En comparant les équations (88), (89a) et (89b) avec les équations (74), (75a) et (75b), nous constatons que le fait d'introduire le terme négligé, sous la forme proposée ici, revient dans le cas ``Prior ´´à remplacer l'énergie réelle de l'électron incident par une énergie fictive plus faible qui dépend de l'état atomique initial considéré . Ce premier résultat montre déjà l'importance du facteur A, compte tenu du fait qu'il faudra discuter la validité de notre hypothèse selon laquelle $\vec{C}$ est constant. Nous y reviendrons dans la suite.

La fonction d'onde relative à l'approximation ``Prior ´´s'obtient de manière analogue au cas précédent, soit :

$$g_o^{+}(\vec{R},\vec{\rho}) = \Gamma(1 - \frac{i}{K_o})\ \Gamma(1 + \frac{i}{K_o})\ e^{i\vec{K}_o(\vec{R}+\vec{\rho})}\ F(\frac{i}{K_o}\ ;\ 1\ ;\ iK_o R - i\vec{K}_o\vec{R}).$$

$$F(-\frac{i}{K_o}\ ;\ 1\ ;\ iK_o\rho - i\vec{K}_o\vec{\rho}) \qquad (90)$$

le module du vecteur d'onde étant maintenant :

$$K_o^2 = k_o^2 - \sum_i C_{oi}^2 \qquad (91)$$

Dans le cas "Post", le fait de supposer le vecteur $\vec{\nabla}_1 \log \phi_n(\vec{r}_1)$ constant revient à considérer que l'électron diffusé possède une énergie fictive plus faible que son énergie diffusée réelle donnée par la loi de conservation de l'énergie.

La fonction d'onde relative à l'approximation "Post" s'écrit :

$$g_n^-(\vec{R},\vec{\rho}) = \Gamma(1-\frac{i}{K_n})\,\Gamma(1+\frac{i}{K_n})\,e^{i\vec{K}_n(\vec{R}+\vec{\rho})}\,.\,F(\frac{-i}{K_n}\,;\,1\,;\,-iK_nR-i\vec{K}_n\vec{R})\,.$$

$$F(+\frac{i}{K_n}\,;\,1\,;\,-iK_n\rho-i\vec{K}_n\vec{\rho}) \qquad (92)$$

avec $$K_n^2 = k_n^2 - \sum_i C_{ni}^2 \qquad (93)$$

Dès maintenant, nous constatons déjà un avantage de l'approximation "Prior" par rapport à "Post" pour la détermination des sections efficaces d'excitation d'un atome considéré initialement dans son état fondamental : en effet, le terme négligé est toujours le même dans le premier cas alors qu'il dépend de l'état final excité dans le second cas.

2) Etude du vecteur $\vec{C}_j = \vec{\nabla}_1 \log \phi_j(\vec{r}_1)$ -

a) Cas de l'approximation "Prior"

Considérons l'atome d'Hydrogène initialement dans son état fondamental, on a :

$$\vec{C}_o = \vec{\nabla}_1 \log \phi_o(r_1) \quad \text{avec} \quad \phi_o(r_1) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\,e^{-r_1}$$

d'où $\sum_i C_{oi}^2 = 1$, résultat important puisqu'il montre que l'énergie fictive résultant de la prise en considération du terme A et correspondant à une énergie donnée de l'électron incident, est constante ; elle ne dépend donc pas de la position r_1 de l'électron atomique et de l'état final excité. Cette conclusion demeure exacte dans le cas limite de l'ionisation de l'atome d'hydrogène.

b) Cas de l'approximation "Post"

Il faut, ici, déterminer $\vec{C}_j$ pour chaque état d'excitation :

b_1 / – Considérons, tout d'abord, le cas de la transition 1s → 2s : l'état final est décrit par la fonction d'onde

$$\phi_{2s}(\vec{r}_1) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}(2 - r_1)\, e^{-r_1/2}$$; le calcul donne :

$$K_n^2 = k_n^2 - \left(\frac{4 - r_1}{4 - 2r_1}\right)^2 \qquad (94)$$

contrairement au cas `` Prior ´´, l'énergie fictive de diffusion n'est plus une constante pour une énergie incidente donnée, elle dépend de la position de l'électron atomique par rapport au noyau. Cependant, l'étude de la courbe de variation de la probabilité de présence, en fonction de la distance de l'électron atomique au noyau, montre une décroissance rapide de part et d'autre de l'extremum ce qui nous autorise à prendre pour le calcul de $\sum_i C_{ni}^2$, la valeur de r correspondant au maximum .

b_2 / – Considérons le cas de l'excitation 1s → $2p_o$; l'état final est décrit par la fonction d'onde $\phi_{2p_o}(\vec{r}_1) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\, z_1 \,,\, e^{-r_1/2}$, le calcul donne :

$$\sum_i C_{ni}^2 = \frac{1}{4} + \frac{1}{r_1^2 \cos^2\theta_1} - \frac{1}{r_1} \qquad (95)$$

Ici, les états ne sont plus à symétrie sphérique, la relation (95) montre que l'énergie fictive diffusée varie fortement en fonction de l'orientation. Il en est de même pour les autres cas.

3) Discussion -

Les fonctions d'onde données par les relations (90) et (92) n'ont pas un comportement asymptotique satisfaisant puisque l'onde non perturbée $\phi_o(\vec{r}_1)\, e^{i\vec{k}_o\vec{r}_2}$ n'est pas obtenue pour un potentiel d'interaction devenant négligeable. Cependant, nous montrerons dans la quatrième partie que, bien que ces solutions ne correspondent pas au problème physique envisagé, elles permettent de retrouver une bonne coïncidence entre les résultats obtenus à partir des approximations `` Prior ´´ et

`` Post '' ce qui montre que les divergences obtenues par les méthodes précédentes sont dûes au terme A négligé.

Néanmoins, l'avantage de cette étude est le suivant : il montre que le terme A, compte tenu de l'hypothèse $\vec{R} \sim \vec{\rho}$, conduit à une modification constante de l'énergie de l'électron incident dans l'approximation `` Prior '' alors que ce n'est plus le cas avec l'approximation `` Post '' puisque l'énergie fictive de l'électron diffusé dépend de la position et de l'orientation de l'electron atomique. C'est la raison pour laquelle, dans la théorie qui suit, nous nous occuperons principalement de la première, en essayant de conserver la forme asymptotique exigée.

III – DEUXIEME MODIFICATION : INTRODUCTION D'UN FACTEUR CORRECTIF DU POTENTIEL D'INTERACTION

L'étude qui précède montre la relation étroite existant entre le terme A et l'énergie de l'électron incident ou diffusé. Par ailleurs, la théorie des collisions exige une forme asymptotique bien déterminée pour la fonction d'onde. Dans ce cas, il apparaît qu'une modification de potentiel doit permettre de tenir compte de l'effet du terme A tout en conservant le vecteur d'onde $\vec{k}_o$ de l'électron incident. Ainsi, la variation d'énergie donnée par les relations (91) ou (92) revient à surestimer le potentiel d'attraction 2/R existant entre un électron fictif, placé au centre de masse des deux électrons, et le noyau de charge + e, par rapport au potentiel de répulsion $2/\rho$ relatif aux deux électrons. Il est alors possible de compenser cet effet en affectant le noyau d'une charge fictive $+\epsilon e$ ($\epsilon < 1$). L'intérêt de ce paramètre est que, bien qu'étant arbitraire, il reste le même quels que soient les états excités considérés. Nous verrons dans la quatrième partie, comment il peut être déterminé.

1) Fonction d'onde de la méthode VPS modifiée –

Cette méthode est une modification de l'approximation V.P.S. dans laquelle le potentiel d'attraction 2/R est remplacé par $2\epsilon/R$. Compte tenu des hypothèses précédentes, la fonction d'onde $g_o^+(\vec{R},\vec{\rho}) = \psi_{Ro}^+(\vec{R})\,\psi_{\rho o}^+(\vec{\rho})$ a chacune de ses composantes ψ qui obéit à l'une des deux équations :

$$\left(\nabla_R^2 + \frac{2\epsilon}{R} + k_o^2\right)\psi_{Ro}^+(\vec{R}) = 0 \qquad (96a)$$

$$\left(\nabla_\rho^2 - \frac{2}{\rho} + k_o^2\right)\psi_{\rho o}^+(\vec{\rho}) = 0 \qquad (96b)$$

d'où la solution :

$$g_o^+ (\vec{R},\vec{\rho}) = N_V \, e^{i\vec{k}_o(\vec{R}+\vec{\rho})} F\left(\frac{i\epsilon}{k_o} ; 1 ; ik_o R - i\vec{k}_o\vec{R}\right) F\left(\frac{-i}{k_o} ; 1 ; ik_o\rho - i\vec{k}_o\cdot\vec{\rho}\right) \quad (97)$$

N_v étant le coefficient de normation déterminé pour que l'amplitude de l'onde incidente soit unitaire ce qui nous donne, en tenant compte de la forme asymptotique de la fonction hypergéométrique F :

$$N_v = e^{\pi(\epsilon-1)/2k_o} \, \Gamma\left(1-\frac{i\epsilon}{k_o}\right) \, \Gamma\left(1+\frac{i}{k_o}\right) \quad (98)$$

Asymptotiquement, on a pour la fonction d'onde totale du système :

$$\psi_o^+ \xrightarrow[r_2 \to \infty]{} \phi_o(r_1) \, e^{i\vec{k}_o\cdot\vec{r}_2 + [i(1-\epsilon) \operatorname{Log} k_o (r_2 - z)]/k_o} + \ldots \quad (99)$$

ce qui est la forme correcte du problème de collision. compte tenu du facteur de phase coulombien qui représente la distorsion de l'onde plane par suite de la présence du potentiel d'interaction.

2) Fonction d'onde de la méthode de Born modifiée -

Revenons à l'équation exacte (71). La solution ψ_o^+ correspondant à la relation (73) est obtenue en supposant que le terme $\frac{2}{|\vec{R}+\vec{\rho}|} \sim \frac{1}{R}$ mais il est également possible d'admettre que, par symétrie, $\frac{2}{|\vec{R}+\vec{\rho}|} \sim \frac{1}{\rho}$ et l'équation approximée (73) s'écrit :

$$\left(\frac{1}{2}\nabla_R^2 + \frac{1}{2}\nabla_\rho^2 + k_o^2\right) g_o^+(\vec{R},\vec{\rho}) = 0 \quad (100)$$

La solution générale a alors pour expression :

$$\psi_o^+ = \phi_o(\vec{r}_1) \, e^{i\vec{k}_o\vec{r}_2} \quad (101)$$

ce qui est la fonction d'onde dans l'approximation de Born.

Il en résulte que la méthode VPS ne peut présenter des avantages sur la méthode de Born que si l'on peut tenir compte des termes négligés.

En ce qui concerne le terme A, nous pouvons, comme précédemment, diminuer le potentiel d'attraction $\frac{1}{\rho}$ en introduisant le facteur ϵ, ce qui conduit à l'équation approchée suivante :

$$\left(\frac{1}{2} \nabla^2_R + \frac{1}{2} \nabla^2_\rho + \frac{\epsilon - 1}{\rho} + k_o^2 \right) g_o^+ (\vec{R}, \vec{\rho}) = 0 \qquad (102)$$

qui est à variables séparées. La solution s'écrit :

$$g_o^+ (\vec{R}, \vec{\rho}) = N_B \; e^{i\vec{k}_o (\vec{R} + \vec{\rho})} \; F \left(\frac{-i\beta}{2 k_o} ; 1 ; i k_o \rho - i \vec{k}_o \vec{\rho} \right) \qquad (103)$$

en posant $\beta = 2 (1 - \epsilon)$ (104)

L'expression (103) est la fonction d'onde modifiée de Born. Elle diffère de la fonction d'onde de Born par le fait qu'il s'introduit un terme tenant compte de la répulsion entre les deux électrons ce qui permet de compenser la surestimation de l'attraction.

Le coefficient de normation a pour valeur :

$$N_B = e^{-\pi \beta / 4 k_o} \; \Gamma \left(1 + \frac{i\beta}{2k_o} \right) \qquad (105)$$

Le comportement asymptotique est tel que :

$$\psi_o^+ \xrightarrow[r_2 \to \infty]{} \phi_o (\vec{r}_1) \; e^{i\vec{k}_o \vec{r}_2 \; + \; i/k_o (1-\epsilon) \log k_o (r_2 - z)} \qquad (106)$$

L'onde plane est encore distordue par un facteur de phase coulombien, la forme asymptotique étant analogue à celle de la méthode VPS modifiée (relation 99).

TROISIEME PARTIE

DETERMINATION DES AMPLITUDES DE TRANSITION DANS LES DIFFERENTES APPROXIMATIONS. SECTIONS EFFICACES DIRECTES D'EXCITATION ET D'IONISATION.

Pour calculer les sections efficaces directes d'excitation et d'ionisation, il faut obtenir, avec les modifications précédentes, les amplitudes de transition T_{on}. La méthode restant la même, nous allons la détailler quelque peu dans l'approximation VPS modifiée, celle de Born modifiée s'en déduisant immédiatement. Par ailleurs, nous examinerons également le cas où le terme A n'est pas négligé ce qui nous permettra, dans l'étude des résultats numériques, de montrer que les divergences dans les méthodes antérieures lui sont imputables. Enfin, le calcul du terme $G_{on}(\vec{q})$, qui est commun, sera envisagé en dernière partie.

I – CALCUL DE L'AMPLITUDE DE TRANSITION DANS LA METHODE V.P.S. MODIFIEE – (notée VPSM).

Les éléments de matrice donnés par la relation (47a) deviennent, avec la fonction d'onde V.P.S.M. :

$$T_{on} = N_v \int \phi_n^*(\vec{r}_1)\, e^{-i\vec{k}_n\vec{r}_2}\, V\, \phi_o(\vec{r}_1)\, e^{i\vec{k}_o\vec{r}_2}\, F\left(\frac{i\epsilon}{k_o}\,;\,1\,;\,ik_oR-i\vec{k}_o\vec{R}\right).$$

$$F\left(-\frac{i}{k_o}\,;\,1\,;\,ik_o\rho-i\vec{k}_o\vec{\rho}\right)\, d\tau_1\, d\tau_2 \qquad (107)$$

Introduisons la transformée de Fourier $G_{on}(\vec{\alpha})$ des états atomiques donnés par la relation (64c) pour séparer les variables $\vec{R}$ et $\vec{\rho}$ dans l'intégrale (107), soit :

$$T_{on} = \frac{8N_v}{(2\pi)^3} \int G_{on}(\vec{q}-\vec{s}) \int e^{i\vec{s}\vec{R}}\, V\, F\left(\frac{i\epsilon}{k_o}\,;\,1\,;\,ik_oR-i\vec{k}_o\vec{R}\right) F\left(-\frac{i}{k_o}\,;\,1\,;\,ik_o\rho-i\vec{k}_o\vec{\rho}\right)$$

$$e^{i(2\vec{q}-\vec{s})\vec{\rho}}\, d\vec{R}\, d\vec{\rho}\, d\vec{s} \qquad (108)$$

avec $\vec{q} = \vec{k}_o - \vec{k}_n$, le potentiel V étant donné par la relation (49).

On considère que l'amplitude de transition relative au terme d'attraction $\frac{1}{r_2}$ est négligeable par rapport au terme de répulsion, par continuité avec la méthode de Born. Dans ce cas, l'amplitude de transition (108) s'écrit :

$$T_{on} = \frac{4N_v}{(2\pi)^3} \underset{\lambda \to 0}{\text{limite}} \int G_{on}(\vec{q}-\vec{s}) \left[\int e^{i\vec{s}\vec{R}-\lambda R} F\left(\frac{i\epsilon}{k_o} ; 1 ; ik_oR - i\vec{k}_o\vec{R}\right) d\vec{R} \right.$$

$$\left. \int \frac{e^{i(2\vec{q}-\vec{s})\vec{\rho}-\lambda\rho}}{\rho} F\left(\frac{-i}{k_o} ; 1 ; ik_o\rho - i\vec{k}_o\vec{\rho}\right) d\vec{\rho} \right] d\vec{s} \qquad (109)$$

λ étant un facteur de Gauss introduit pour rendre les intégrales en $\vec{R}$ et $\vec{\rho}$ convergentes.

L'intégrale (109) ne peut être calculée analytiquement aussi introduit-on une deuxième hypothèse qui est la suivante : puisque l'intégrale en $\vec{R}$ devient infinie pour $\vec{s} = \vec{o}$, on admet que la principale contribution à la valeur de T_{on} provient de $\vec{s} = \vec{o}$ ce qui nous permet de remplacer $G_{on}(\vec{q}-\vec{s})$, fonction de $\vec{s}$, par $G_{on}(\vec{q})$. C'est une approximation dite "en pic".

L'intégrale en $\vec{s}$ a pour valeur :

$$\int e^{i\vec{s}(\vec{R}-\vec{\rho})} d\vec{s} = (2\pi)^3 \, \delta(\vec{R}-\vec{\rho}) \qquad (110)$$

L'amplitude de transition approchée s'écrit :

$$T_{on} = 4N_v G_{on}(\vec{q}) \underset{\lambda \to 0}{\text{limite}} \int \frac{e^{2i\vec{q}\vec{r} - 2\lambda r}}{r} F\left(\frac{i\epsilon}{k_o} ; 1 ; ik_or - i\vec{k}_o\vec{r}\right) .$$

$$F\left(\frac{-i}{k_o} ; 1 ; ik_or - i\vec{k}_o\vec{r}\right) d\vec{r} \qquad (111)$$

Le calcul peut être fait en utilisant la représentation intégrale de la fonction hypergéométrique suivant la méthode de Norsieck /62/ étendue par Crothers /63/, /64/ au cas d'une fonction hypergéométrique F (a,b,1,z) correspondant à $|z| > 1$.

En utilisant la notation de Crothers, nous avons :

$$T_{on} = 4N_v G_{on}(q) \underset{\lambda \to 0}{\text{limite}} \Lambda \left(2\vec{q}, 2\lambda, \frac{1}{k_o}, \frac{\epsilon}{k_o}, -\vec{k}_o, -\vec{k}_o \right) \tag{112}$$

et

$$z = \left[\frac{q^2 + k_o^2 - k_n^2 + 2i\lambda k_o}{k_o^2 - k_n^2 - q^2 + 2i\lambda k_o - \lambda^2} \right]^2 \tag{113}$$

dans ce cas $|z| > 1$ quel que soit q de sorte que :

$$\Lambda \left(2\vec{q}, 2\lambda, o, \frac{1}{k_o}, \frac{\epsilon}{k_o}, -\vec{k}_o, -\vec{k}_o \right) = \frac{\pi Z}{q^2+\lambda^2} \left[\frac{q^2 + \lambda^2}{q^2+\lambda^2-\vec{k}_o\vec{q}-i\lambda k_o} \right]^{\frac{i(\epsilon-1)}{k_o}} \tag{114a}$$

avec, pour Z, l'expression suivante :

$$Z = e^{\pm \pi/k_o} e^{i/k_o} \frac{\Gamma\left(\frac{i\epsilon}{k_o} + \frac{i}{k_o}\right)}{\Gamma\left(\frac{i\epsilon}{k_o}\right) \Gamma\left(1+\frac{i}{k_o}\right)} F\left(-\frac{i}{k_o}, -\frac{i}{k_o}; 1-\frac{i}{k_o} - \frac{i\epsilon}{k_o}; \frac{1}{z}\right)$$

$$+ e^{\mp \frac{\pi\epsilon}{k_o}} z^{-\frac{i\epsilon}{k_o}} \frac{\Gamma\left(\frac{-i\epsilon}{k_o} - \frac{i}{k_o}\right)}{\Gamma\left(\frac{-i}{k_o}\right) \Gamma\left(1 \frac{-i\epsilon}{k_o}\right)} F\left(\frac{i\epsilon}{k_o}; \frac{i\epsilon}{k_o}; 1 + \frac{i\epsilon}{k_o} + \frac{i}{k_o}; \frac{1}{z}\right) \tag{114b}$$

Le signe supérieur correspond à $q^2 > k_o^2 - k_n^2$ et le signe inférieur à $q^2 < k_o^2 - k_n^2$.

Puisque λ et k_o sont des grandeurs positives, on a :

$$\arg \left[\frac{q^2 + \lambda^2}{q^2 + \lambda^2 - \vec{k}_o\vec{q} - i\lambda k_o} \right] = \begin{cases} = o \text{ si } q^2 > \vec{k}_o\vec{q} \\ = \pi \text{ si } q^2 < \vec{k}_c\vec{q} \end{cases} \tag{115}$$

d'où :

$$T_{on} = 4N_v \bar{A} Z G_{on}(q) \frac{\pi}{q^2} e^{\frac{i(\epsilon-1)}{k_o} \text{Log} \left| \frac{q^2}{q^2 - \vec{k}_o\vec{q}} \right|} \tag{116a}$$

avec

$$\bar{A} = \begin{cases} 1 \quad \text{si } q^2 > k_o^2 - k_n^2 & (116b) \\ e^{\frac{\pi(1-\epsilon)}{k_o}} \quad \text{si } q^2 < k_o^2 - k_n^2 & (116c) \end{cases}$$

Soit :

$$|T_{on}|^2 = 16\,|N_v|^2\,\bar{A}^2\,ZZ^*\,|G_{on}(q)|^2\,\frac{\pi 2}{q^4} \qquad (117a)$$

avec :

$$|N_V|^2 = \frac{e^{\pi(\epsilon-1)/k_o}\,\pi^2\,\epsilon}{k_o^2\,\mathrm{sh}\left(\frac{\pi\epsilon}{k_o}\right)\,\mathrm{sh}\left(\frac{\pi}{k_o}\right)} \qquad (117b)$$

La section efficace directe s'obtient en remplaçant $|T_{on}|^2$ donnée par les relations (117) dans l'expression (46), soit :

$$\sigma_{on}^{d} = \pi a_o^2\,C_V \left[e^{\frac{2\pi(1-\epsilon)}{k_o}} \int_{k_o - k_n}^{\sqrt{k_o^2 - k_n^2} - \lambda} \frac{|G_{on}(q)|^2}{q^3}\,ZZ^*\,dq + \int_{\sqrt{k_o^2 - k_n^2} + \lambda}^{k_o + k_n} \frac{|G_{on}(q)|^2}{q^3}\,ZZ^*\,dq \right] \qquad (118a)$$

avec :

$$C_V = \frac{8\pi^2\,\epsilon\,e^{\pi(\epsilon-1)/k_o}}{k_o^4\,\mathrm{sh}\left(\frac{\pi\epsilon}{k_o}\right)\,\mathrm{sh}\left(\frac{\pi}{k_o}\right)} \qquad (118b)$$

II – CALCUL DE L'AMPLITUDE DE TRANSITION DANS LA METHODE DE BORN MODIFIEE – (notée B.M.).

Les éléments de matrice (47a) relatifs à la fonction d'onde donnée par l'équation (113) s'écrivent :

$$T_{on} = N_B \int \phi_n^*(\vec{r}_1)\, e^{-i\vec{k}_n\vec{r}_2}\, V\, \phi_o(\vec{r}_1)\, e^{i\vec{k}_o\vec{r}_2}\, F\left(-\frac{i\beta}{2k_o}\,;\,1\,;\,ik_o\rho - i\vec{k}_o\vec{\rho}\right) d\tau_1\, d\tau_2 \quad (119)$$

soit encore, en introduisant la transformée de Fourier des états atomiques :

$$T_{on} = \frac{4N_B}{(2\pi)^3} \lim_{\lambda \to 0} \int G_{on}(\vec{q}-\vec{s}) \left[\int e^{i\vec{s}\vec{R} - \lambda R}\, d\vec{R} \right.$$

$$\left. \int \frac{e^{i(2\vec{q}-\vec{s})\vec{\rho} - \lambda\rho}}{\rho}\, F\left(\frac{-i\beta}{2k_o}\,;\,1\,;\,ik_o\rho - i\vec{k}_o\vec{\rho}\right) d\vec{\rho} \right] d\vec{s} \quad (120)$$

Avec les deux hypothèses introduites dans le cas de la méthode VPS modifiée, l'expression de l'amplitude de transition approchée devient :

$$T_{on} = 4N_B\, G_{on}(q) \int \frac{e^{2i\vec{q}\vec{r} - 2\lambda r}}{r}\, F\left(\frac{-i\beta}{2k_o}\,;\,1\,;\,ik_o r - i\vec{k}_o\vec{r}\right) d\vec{r} \quad (121)$$

ou encore, en utilisant la notation de Crothers pour exprimer cette intégrale,

$$T_{on} = 4N_B\, G_{on}(q) \lim_{\lambda \to 0} \Lambda\left(2\vec{q}, 2\lambda, \frac{\beta}{2k_o}, 0, -\vec{k}_o, 0\right) \quad (122)$$

$$= 4N_B\, G_{on}(q) \lim_{\lambda \to 0} \frac{\pi}{q^2 + \lambda^2} \left| \frac{q^2 + \lambda^2}{q^2 + \lambda^2 - \vec{q}\vec{k}_o - i\lambda k_o} \right|^{\frac{-i\beta}{2k_o}} \quad (123)$$

avec β donné par la relation (104)

Si l'on compare les valeurs des intégrales dans les équations (112) et (122), on constate que celle qui correspond à la méthode de Born modifiée est égale à l'intégrale de la méthode VPS modifiée pour $Z = 1$ d'où :

$$T_{on} = 4N_B \, \bar{A} \, G_{on}(q) \frac{\pi}{q^2} \, e^{\frac{i(\epsilon-1)}{k_o} \log \left| \frac{q^2}{q^2 - \vec{k}_o \vec{q}} \right|} \tag{124}$$

le terme $\bar{A}$ étant donné par les relations (116). On a :

$$\left| T_{on} \right|^2 = 16 \left| N_B \right|^2 \bar{A}^2 \left| G_{on}(q) \right|^2 \frac{\pi 2}{q^4} \tag{125}$$

avec

$$\left| N_B \right|^2 = \frac{e^{-\pi\beta/2k_o} \, \pi\beta}{2k_o \, \mathrm{sh}\left(\frac{\pi\beta}{2k_o}\right)} \tag{126}$$

L'expression de la section efficace dans la méthode de Born modifiée s'écrit donc :

$$\sigma_{on} = C_B \left[e^{\frac{2\pi(1-\epsilon)}{k_o}} \int_{k_o - k_n}^{\sqrt{k_o^2 - k_n^2} - \lambda} \frac{\left| G_{on}(q) \right|^2}{q^3} \, dq + \int_{\sqrt{k_o^2 - k_n^2} - \lambda}^{k_o + k_n} \frac{\left| G_{on}(q) \right|^2}{q^3} \, dq \right]_{k_o - k_n} \tag{127a}$$

avec

$$C_B = \frac{4\pi\beta \, e^{-\pi\beta/2k_o}}{k_o^3 \, \mathrm{sh}\left(\pi\beta/2k_o\right)} \tag{127b}$$

On observe que $\sigma_{on} \xrightarrow[k_o \to \infty]{} \sigma_{on}^{Born}$

et que $\sigma_{on} \xrightarrow[\epsilon \to 1]{} \sigma_{on}^{Born}$

III -- CALCUL DE L'AMPLITUDE DE TRANSITION EN CONSIDERANT LE TERME A.

1) Cas de l'approximation "Prior"-

La fonction d'onde est donnée par la relation (90) et les éléments de matrice correspondants ont pour valeur :

$$T_{on} = N \int \phi_n^* (\vec{r}_1) \quad e^{-i\vec{k}_n \vec{r}_2} \quad V \phi_o (\vec{r}_1) \quad e^{i\vec{K}_o \vec{r}_2} \quad F\left(\frac{i}{K_o} ; 1 ; iK_o R - i\vec{K}_o \vec{R}\right).$$

$$F\left(-\frac{i}{K_o} ; 1 ; iK_o \rho - iK_o \rho\right) d\tau_1 \quad d\tau_2 \qquad (128)$$

Posons $\vec{q}' = \vec{K}_o - \vec{k}_n$ où $\vec{K}_o$ est le vecteur d'onde fictif de l'électron incident de direction $\vec{k}_o$ et de module $K_o = \sqrt{k_o^2 - 1}$, les mêmes hypothèses que précédement sont introduites pour calculer l'expression (128) ce qui nous donne :

$$T_{on} = 4N \, G_{on} (\vec{q}') \underset{\lambda \to 0}{\text{limite}} \Lambda \left(2\vec{q}', 2\lambda, \frac{1}{K_o}, \frac{1}{K_o}, -\vec{K}_o, -\vec{K}_o \right) \qquad (129)$$

soit :

$$T_{on} = 4N \, Z \, G_{on} (\vec{q}') \frac{\pi^2}{q'^2} \qquad (130)$$

La détermination de Z est motivée par le fait que z est supérieure ou inférieure à un ; ici :

$$z = \left[\frac{K_o^2 - k_n^2 + q'^2}{K_o^2 - k_n^2 - q'^2} \right]^2 \qquad (131)$$

avec $K_o^2 = k_o^2 - 1$

$$z = \left[\frac{k_o^2 - k_n^2 - 1 + q'^2}{k_o^2 - k_n^2 - 1 - q'^2} \right]^2 \qquad (132)$$

Or, pour n'importe quel état excité, nous avons toujours $k_o^2 - k_n^2 < 1$ (l'unité d'énergie atomique étant l'énergie d'ionisation de l'atome) d'où, quel que soit q', on a $z < 1$ soit :

$$T_{on} = 4N\, G_{on}(\vec{q}')\, \frac{\pi}{q'^2}\, F\left(\frac{-i}{K_o}\, ;\, \frac{+i}{K_o}\, ;\, 1\, ;\, z\right) \qquad (133)$$

La section efficace directe d'excitation a pour expression :

$$\sigma_{on} = \frac{8\pi^2}{k_o^2\, K_o^2\, [\,\mathrm{sh}\,(\frac{\pi}{K_o})\,]^2} \int_{k_o - k_n}^{k_o + k_n} \frac{|G_{on}(q')|^2}{q'^4}\, F\left(\frac{-i}{K_o}\, ;\, \frac{i}{K_o}\, ;\, 1\, ;\, z\right)^2 q\, dq \qquad (134)$$

2) Cas de l'approximation "Post"-

Les éléments de matrice donnés par la relation (47b), en tenant compte de la fonction d'onde (92), s'écrivent :

$$T_{on} = N_n^* \int \phi_o(\vec{r}_1)\, e^{i\vec{k}_o\vec{r}_2}\, V\, \phi_n^*(\vec{r}_1)\, e^{-i\vec{K}_n\vec{r}_2}\, F\left(\frac{+i}{K_n}\, ;\, 1\, ;\, +iK_n R + i\vec{K}_n\vec{R}\right).$$

$$F\left(\frac{-i}{K_n}\, ;\, 1\, ;\, iK_n\rho + i\vec{K}_n\vec{\rho}\right)\, d\tau_1\, d\tau_2 \qquad (135)$$

En introduisant les mêmes hypothèses que pour les méthodes précédentes, nous obtenons :

$$T_{on} = 4N_n^*\, G_{on}(\vec{q}'')\, \underset{\lambda \to 0}{\text{limite}}\, \Lambda\left(2\vec{q}'', 2\lambda, \frac{1}{K_n}, \frac{1}{K_n}, \vec{K}_n, \vec{K}_n\right) \qquad (136)$$

avec $\vec{q}'' = \vec{k}_o - \vec{K}_n$, $\vec{K}_n$ étant un vecteur onde dirigé suivant l'onde diffusée dont le module est donné par la relation (93). On obtient :

$$T_{on} = 4N_n^*\, Z\, G_{on}(\vec{q}'')\, \frac{\pi}{q''^2} \qquad (137)$$

Z est déterminé par l'expression de z qui est ici :

$$z = \left[\frac{\vec{q}'' \ \vec{K}_n}{q''^2 + \vec{q}'' \ \vec{K}_n} \right]^2 = \left[\frac{k_o^2 - K_n^2 - q''^2}{q''^2 + k_o^2 - K_n^2} \right]^2 \qquad (138)$$

qui, quelle que soit la valeur de q'', est toujours inférieur à 1, donc :

$$T_{on} = 4N_n^* \, G_{on}(\vec{q}'') \, \frac{\pi}{q''^2} \, F\left(\frac{-i}{K_n} \, ; \, \frac{i}{K_n} \, ; \, 1 \, ; \, z \right) \qquad (139)$$

La section efficace directe a pour expression :

$$\sigma_{\check{o}n} = \frac{8\pi^2}{k_o^2 K_n^2 \left(\mathrm{sh} \frac{\pi}{K_n} \right)^2} \int_{k_o - k_n}^{k_o + k_n} \frac{|G_{on}(q'')|^2}{q''^4} \left| F\left(-\frac{i}{K_n} \, ; \, \frac{i}{K_n} \, ; 1 \, ; z \right) \right|^2 q \, dq \qquad (140)$$

IV – CALCUL DES TRANSITIONS $G_{on}(\vec{q})$ CORRESPONDANT AUX DIFFERENTS ETATS EXCITES ET A L'IONISATION.

1) Cas de l'excitation –

Le terme $G_{on}(\vec{q})$ est donné par l'expression suivante (relation (63)):

$$G_{on}(\vec{q}) = \langle \phi_n(\vec{r}_1) | e^{i\vec{q}\vec{r}_1} | \phi_o(\vec{r}_1) \rangle \qquad (141)$$

où $\phi_n(\vec{r}_1)$ représente l'état final de l'atome d'hydrogène.
Pour effectuer le calcul des $G_{on}(\vec{q})$ relatifs aux différentes excitations considérées, on développe $e^{i\vec{q}\vec{r}}$ sous la forme :

$$e^{i\vec{q}\vec{r}} = \sum_{\ell} i^{\ell} \, (2\ell + 1) \, J_{\ell}(qr) \, P_{\ell}(\cos\theta) \qquad (142)$$

en tenant compte du fait que :

$$P_{\ell}(\cos\theta) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell + 1}} \; Y_{\ell}^{o}(\theta, \phi) \qquad (143)$$

Les fonctions sphériques étant orthonormées, il vient :

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} Y_{\ell}^{m*}(\theta,\phi)\, Y_{\ell'}^{o}(\theta,\phi) \sin\theta \, d\theta \, d\phi = \delta_{\ell\ell'} \cdot \delta_{mo} \qquad (144)$$

or

$$\int_0^{\infty} r^n e^{-ar} \cos br \, dr = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial a^n} \left[\frac{a}{a^2 + b^2} \right] \qquad (145a)$$

et

$$\int_0^{\infty} r^n e^{-ar} \sin br \, dr = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial a^n} \left[\frac{b}{a^2 + b^2} \right] \qquad (145b)$$

d'où :

– a) Pour les états excités s :

Le calcul conduit aux expressions suivantes :

$$G_{1s\to 2s}(q) = \frac{4\sqrt{2}\, q^2}{(q^2 + \frac{9}{4})^3} \qquad (146)$$

$$G_{1s\to 3s}(q) = \frac{16\sqrt{3}\, q^2 (3q^2 + \frac{16}{9})}{27 (q^2 + \frac{16}{9})^4} \qquad (147)$$

$$G_{1s\to 4s}(q) = \frac{q^2 \left[32 q^4 + 44 q^2 + \frac{250}{16} \right]}{16 (q^2 + \frac{25}{16})^5} \qquad (148)$$

– b) Pour les états excités p :

$$G_{1s\to 2p_o}(q) = \frac{6\sqrt{2}\, i\, q}{(q^2 + \frac{9}{4})^3} \tag{149}$$

$$G_{1s\to 3p_o}(q) = \frac{64\, i\, q \left[q^2 + \frac{16}{27}\right]}{9\sqrt{2}\,(q^2 + \frac{16}{9})^4} \tag{150}$$

$$G_{1s\to 4p_o}(q) = \frac{15\, i\, q \left[4q^4 + \frac{11}{2} q^2 + \frac{125}{64}\right]}{8\sqrt{5}\left[q^2 + \frac{25}{16}\right]^5} \tag{151}$$

$G_{1s\to np\pm 1}(q) = o$ par suite de l'orthogonalité des fonctions sphériques, l'intégrale sur les angles est nulle pour $m \neq o$, ces états ne contribuent pas à la section efficace.

– c) Pour l'état excité 3 d :

$$G_{1s\to 3d}(q) = \frac{64}{72\, q\sqrt{6}} \left[\frac{253 - 72\, q^2}{(q^2 + \frac{16}{9})^4}\right] \tag{152}$$

2) Cas de l'ionisation –

Dans le cas de l'ionisation /65/ ; une intégration supplémentaire relative aux états finaux de l'électrons émergent doit être faite. Soient k, θ_k et ϕ_k les coordonnées polaires de l'électron ejecté dont le vecteur d'onde est $\vec{k}$ (l'énergie est alors $\frac{k^2}{2}$). Si l'on choisit $\vec{q}$ comme axe polaire, la section efficace a pour expression.

$$_i = \frac{1}{2\pi k_o^2} \int_0^{k_{max}} k^2\, dk \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \sin\theta_k\, d\theta_k\, d\phi_k \int_{k_o - k_n}^{k_o + k_n} \left| T_{oi}(\vec{k}, q) \right|^2 q\, dq \tag{153}$$

avec $k_{max} = k_o^2 - 1$

Les expressions de $T_{oi}(\vec{k},q)$ sont données respectivement par les relations (117) et (125) pour les deux méthodes envisagées. Il nous reste à déterminer la transition $G_{oi}(\vec{k},\vec{q})$ correspondante.

L'électron atomique, quand il quitte l'atome, se trouve soumis au champ du noyau (champ coulombien attractif) ; la fonction d'onde qui décrit cet état et qui doit avoir un comportement asymptotique d'onde plane /66/ s'écrit :

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}_1) = N_k \, e^{i\vec{k}\vec{r}_1} \, F\left(\frac{-i}{k} ; 1 ; -ikr_1 - i\vec{k}\vec{r}_1\right) \tag{154}$$

$$\text{avec } N_k = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \, e^{\pi/2k} \, \Gamma\left(1 + \frac{i}{k}\right) \tag{155}$$

Nous obtenons alors :

$$G_{oi}(\vec{k},\vec{q}) = \int \psi_k^*(\vec{r}_1) \, e^{i\vec{q}\vec{r}_1} \, \phi_o(\vec{r}_1) \, d\tau_1$$

$$= \frac{N_k^*}{\sqrt{\pi}} \int e^{i(\vec{q}-\vec{k})\vec{r}_1} \, e^{-r_1} \, F\left(\frac{i}{k} ; 1 ; ikr_1 + i\vec{k}\vec{r}_1\right) d\tau_1 \tag{156}$$

On pose :

$$\vec{q} - \vec{k} = \vec{p} \; ; \; \lambda = 1$$

d'où :

$$G_{oi}(\vec{k},\vec{q}) = \frac{N_k^*}{\sqrt{\pi}} \int e^{i\vec{p}\vec{r}_1 - \lambda r_1} \, F\left(\frac{i}{k} ; 1 ; ikr_1 + i\vec{k}\vec{r}_1\right) d\tau_1$$

En utilisant la notation de Crothers, nous avons :

$$G_{oi}(\vec{k},\vec{q}) = \frac{-N^*_k}{\sqrt{\pi}} \left| \frac{\partial}{\partial\lambda} \left[\Lambda\left(\vec{p},\lambda,o,\frac{1}{k},o,\vec{k}\right)\right] \right|_{\lambda=1}$$

$$= -N^*_k\, 4\sqrt{\pi}\, \frac{\partial}{\partial\lambda} \left[\frac{1}{p^2+\lambda^2} \left[\frac{p^2+\lambda^2}{p^2+\lambda^2+2\vec{k}\vec{p}-2i\lambda k} \right]^{i/k} \right] \Bigg|_{\lambda=1}$$

$$= \frac{-16\sqrt{\pi}\,N^*_k}{(p^2+1)^2} \left[\frac{p^2+1}{p^2+1+2\vec{k}\vec{p}-2ik} \right]^{i/k} \left[\frac{-p^2-\vec{k}\vec{p}+i\left(k+\frac{\vec{k}\vec{p}}{p}\right)}{p^2+1+2\vec{k}\vec{p}-2ik} \right] \qquad (157)$$

$$\left|G_{oi}(\vec{k},\vec{q})\right|^2 = \frac{64\,q^2\left[q^2-2kq\cos\theta_k+(k^2+1)\cos^2\theta_k\right]}{\pi k\left[1-e^{\frac{-2\pi}{k}}\right]\left[q^2+k^2+1-2kq\cos\theta_k\right]^4\left[q^2+k^2+1+2kq\right]\left[q^2+k^2+1-2kq\right]}$$

$$e^{\frac{-2}{k}\operatorname{arctg}(2k/q^2-k^2+1)} \qquad (158)$$

où θ_k est l'angle des vecteurs $\vec{k}$ et $\vec{q}$.

L'intégration sur tous les angles d'émission de l'électron ejecté donne :

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} \left|G_{oi}(\vec{k},\vec{q})\right|^2 \sin\theta_k\, d\theta_k\, d\phi_k = \frac{256\,q^2\left[q^2+\frac{1}{3}(k^2+1)\right]e^{\frac{-2}{k}\operatorname{arctg}\left(\frac{2k}{q^2-k^2+1}\right)}}{k\left[1-e^{-2\pi/k}\right]\left[q^2+k^2+1-2kq\right]^3\left[q^2+k^2+1+2kq\right]^3}$$

(159)

La section efficace d'ionisation de la méthode VPS modifiée s'écrit, en tenant compte de (117a), (118b), (153) et (159)

$$\sigma_i^V = 256\ C_V \left[\int_0^{\sqrt{k_o^2-1}} kdk \left(e^{\frac{2\pi(1-\epsilon)}{k_o}} \int_{k_o-\sqrt{k_o^2-1-k^2}}^{\sqrt{k^2+1}-\lambda} f(k,q)\ ZZ^*\ dq \ + \right.\right.$$

$$\left.\left. \int_{\sqrt{k^2+1}+\lambda}^{k_o+\sqrt{k_o^2-1-k^2}} f(k,q)\ ZZ^*\ dq \right) \right] \pi a_o^2 \qquad (160)$$

avec

$$f(k,q) = \frac{\left[q^2 + \frac{1}{3}(k^2+1)\right] e^{-(2/k)\ \mathrm{arctg}\left(\frac{2k}{q^2-k^2+1}\right)}}{q\left[1-e^{-2\pi/k}\right]\left[q^2+k^2+1-2kq\right]^3\left[q^2+k^2+1+2kq\right]^3} \qquad (161)$$

De même, nous avons pour expression de la section efficace d'ionisation de la méthode de Born modifiée, en tenant compte des relations (125) (127b) et (153) :

$$\sigma_i^B = 256\ C_B \left[\int_0^{\sqrt{k_o^2-1}} kdk \left(e^{\frac{2\pi(1-\epsilon)}{k_o}} \int_{k_o-\sqrt{k_o^2-1-k^2}}^{\sqrt{k^2+1}-\lambda} f(k,q)\ dq \ + \right.\right.$$

$$\left.\left. \int_{\sqrt{k^2+1}+\lambda}^{k_o+\sqrt{k_o^2-1-k^2}} f(k,q)\ dq \right) \right] \pi a_o^2 \qquad (162)$$

Les calculs numériques de ces différentes expressions vont être envisagés dans la partie suivante.

QUATRIEME PARTIE

RESULTATS NUMERIQUES – DISCUSSION ET INTERPRETATION INFLUENCE DE L'ECHANGE

Dans cette partie, les calculs numériques des sections efficaces d'excitation et d'ionisation sont effectués en utilisant les différentes relations établies précédemment. Les valeurs numériques correspondantes sont rassemblées dans des tableaux placés en annexe.

Rappelons que les différentes approximations faites sont les suivantes :

1) – Dans le calcul des éléments de matrice, le terme relatif au potentiel d'attraction $1/r_2$ est négligé. Cette hypothèse est justifiée par Omidvar /67/ qui montre que $G_{on}(o) = o$ quand les intégrales en $\vec{R}$ et $\vec{\rho}$ tendent vers l'infini, ce qui implique que la contribution de l'élément de matrice correspondant à l'attraction dans le calcul de T_{on} est effectivement négligeable par rapport à l'élément correspondant à la répulsion dans la méthode V.P.S. (il est nul dans le cas de la méthode de Born).

2) – Le terme A [(relation (72)] est négligé dans les deux méthodes pour lesquelles il possède la même valeur.

3) – Le potentiel d'attraction $2/|\vec{R}+\vec{\rho}$ est remplacé par ϵ/R dans l'approximation VPSM et ϵ/ρ dans le cas de BM.

4) – Le calcul des éléments T_{on} nécessite le remplacement des termes $G_{on}(\vec{q}-\vec{s})$ par $G_{on}(\vec{q})$ pour évaluer l'intégrale correspondante, c'est ce qui est généralement appelé "approximation en pic". Son effet consiste en une surestimation de la région voisine de $\vec{q} = \vec{s}$ et il peut en résulter des erreurs importantes /68/ et /69/.

Le premier paragraphe a pour objet l'étude de la deuxième approximation et l'on montre que la divergence entre les résultats "Prior" et "Post" lui est imputable. Dans la partie suivante l'influence du facteur correctif ϵ est envisagée, l'interprétation des résultats obtenus nous permet de dégager l'importance des deux dernières approximations. Ainsi, on est conduit à proposer une modification de l'approximation en pic. L'étude de la convergence entre les méthodes VPSM et BM,

d'une part, entre ces dernières et les résultats expérimentaux connus (1s → 2s, 1s → 2p et ionisation), d'autre part, constitue la partie principale de la suite.

Puis les effets de l'échange sont envisagés et le problème est étudié dans divers cas.

Enfin, les calculs sont effectués pour différents états excités en utilisant, là encore, les deux méthodes proposées.

I – ETUDE DE LA PREMIERE MODIFICATION : Influence du Terme A.

1) Résultats des approximations "Prior" et "Post" de la méthode VPS –

Les courbes des figures 1 et 2 représentent respectivement les sections efficaces directes d'excitation relatives aux transitions 1s → 2s et 1s → 2p. Les courbes notées (a) correspondent à l'approximation " Prior " dont l'état est décrit par la fonction d'onde donné par la relation (78) ; celles qui sont notées (b) proviennent de l'utilisation de la fonction d'onde indiquée par la relation (79) (c'est-à-dire à l'approximation " Post ") ; les courbes (c) représentent les sections efficaces dans l'approximation de Born calculées par la relation (66) (cette notation littérale est utilisée pour tous les résultats relatifs à la première modification, une ponctuation étant introduite quand le terme A est pris en considération). Les résultats expérimentaux sont également représentés.

Nous observons une divergence importante aux basses énergies entre les résultats relatifs aux deux méthodes étudiées, ils ne concordent que pour des énergies supérieures à 150eV.

2) Etude des divergences entre les approximations VPS "Prior" et "Post" –

Notre première modification consiste à introduire le terme A, sous la forme proposée dans la deuxième partie, pour tenir compte des états atomiques. Les fig. 3, 4, 5, 6 sont respectivement relatives aux sections efficaces 1s → 2s, 1s → 3s, 1s → 4s et 1s → 2p. Dans chaque cas, la courbe (a') est obtenue par la relation (134). Les $G_{on}(q)$ sont indiqués dans la troisième partie pour chaque état excité [relations (146) à (149)] l'énergie fictive de l'électron incident étant donné par $K_o^2 = k_o^2 - 1$. La courbe (b'), calculée à partir de l'expression (140), coïncide pratiquement avec la courbe (b) représentant l'approximation VPS "Post" dans laquelle le terme A est négligé ($K_n \# k_n$) : les $\sum_i C_{ni}^2$ sont calculés pour des distances r_1 correspondant au maximum de probabilité de présence de l'électron atomique dans l'état excité ns, de plus, on prend $\theta = o$ dans le cas de l'état excité 2p.

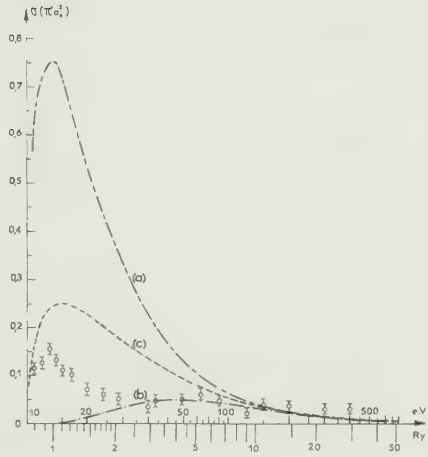

FIG. 1 — Variations de $\sigma_{1s\to 2s}$ en fonction de l'énergie

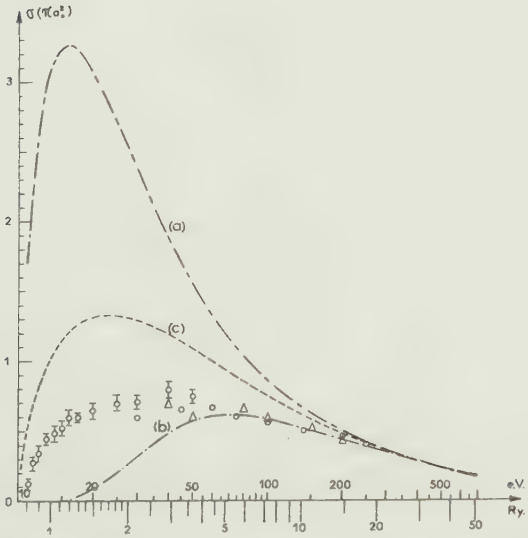

FIG. 2 — Variations de $\sigma_{1s\to 2p}$ en fonction de l'énergie

Courbes a : Approximation VPS "Prior"
Courbes b : Approximation VPS "Post"
Courbes c : Approximation de Born
ϕ o Δ : Valeurs expérimentales

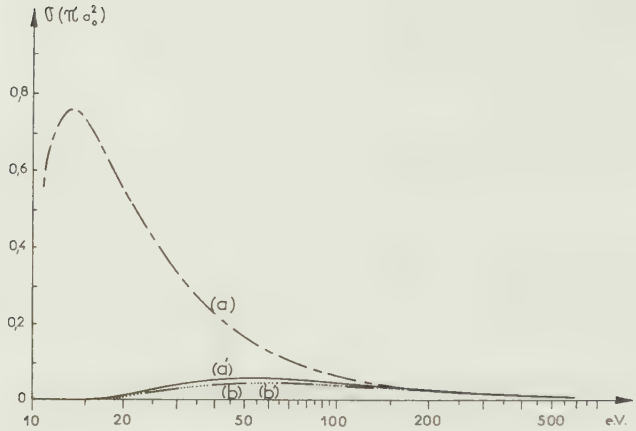

FIG. 3 — Variations de $\sigma_{1s \to 2s}$ en fonction de l'énergie

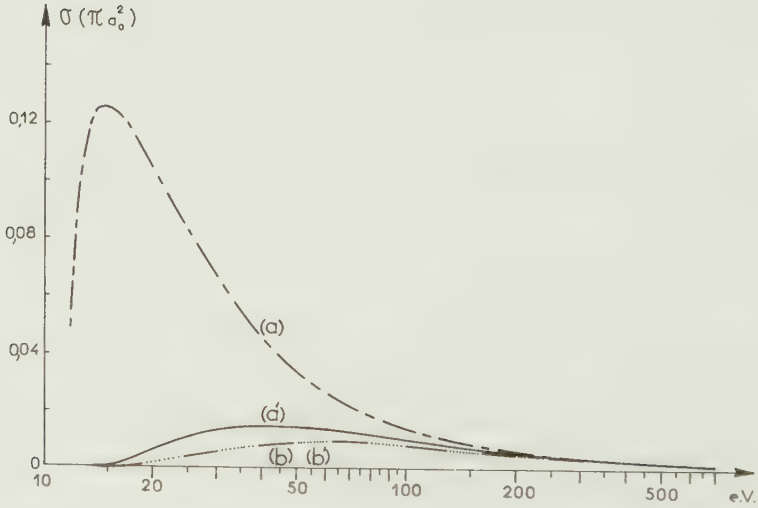

FIG. 4 — Variations de $\sigma_{1s \to 3s}$ en fonction de l'énergie

Courbes (a) et (b) : Approximations VPS "Prior" et "Post"
Courbes (a') et (b') : Approximations VPS "Prior" + A et "Post" + A

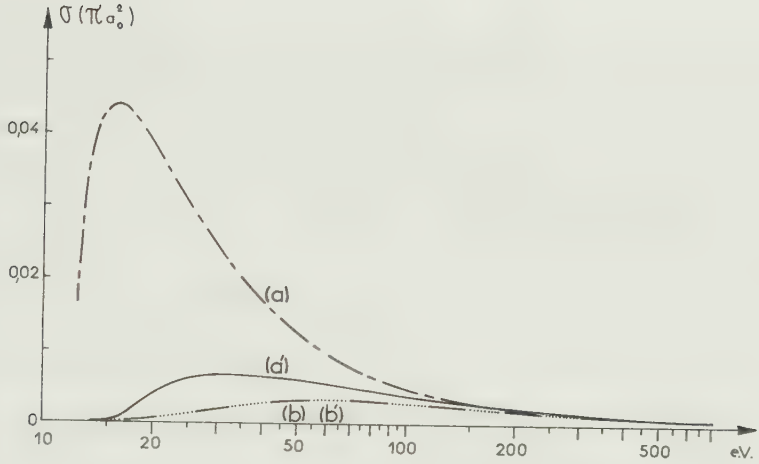

FIG. 5 — Variations de $\sigma_{1s\to 4s}$ en fonction de l'énergie

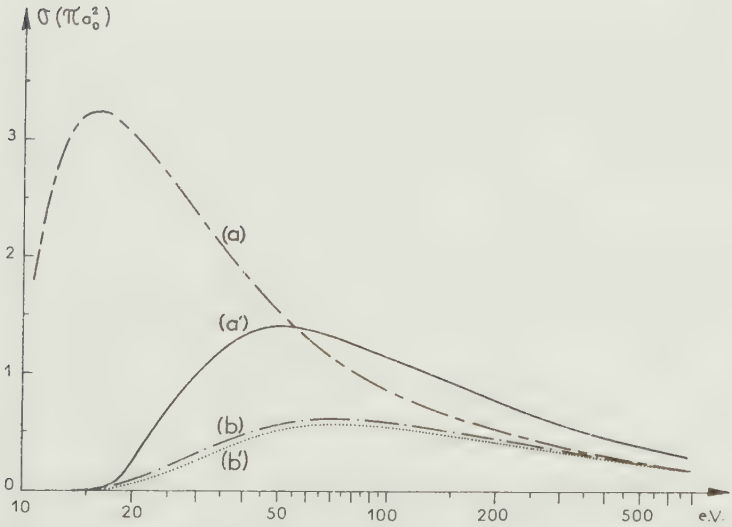

FIG. 6 — Variations de $\sigma_{1s\to 2p}$ en fonction de l'énergie

Courbes (a) et (b) : Approximations VPS "Prior" et "Post"

Courbes (a') et (b') : Approximations VPS "Prior" + A et "Post" + A

L'examen de ces courbes montre une bonne convergence entre les résultats des approximations `` Prior ´´ et `` Post ´´ pour les états excités à symétrie sphérique ; elle est plus mauvaise pour l'état excité 2p, ce qui peut être attribué à l'influence de l'angle θ. De plus, on remarque que, contrairement au cas où le terme A est négligé, les deux approximations donnent des résultats qui se rejoignent aux faibles énergies; comme c'est également le cas pour des énergies plus élevées, la divergence ne subsiste que dans les régions intermédiaires.

Les variations du terme $\sum_i C^2_{ni}$, dans le cas d'états excités à symétrie sphérique, sont faibles pour des valeurs de r_1 qui correspondent à une probabilité de présence non négligeable de l'électron ($0{,}03 < \sum_i C^2_{ni} < 0{,}1$ dans le cas de 1s → 2s) ce qui montre que, pour ces états, l'hypothèse introduite $\sum_i C^2_{ni} =$ cte est valable dans le cas `` Post ´´. Au contraire, la relation (95) montre que $\sum_i C^2_{ni}$ dépend fortement des variations de θ, cette somme pouvant prendre des valeurs importantes ; ainsi, l'hypothèse introduite n'est plus justifiée et c'est ce qui explique la divergence.

3) Conclusion –

Les fonctions d'onde choisies pour représenter l'état du système, qui sont données par les relations (134) et (140), n'ont pas un comportement asymptotique satisfaisant donc elles ne représentent pas physiquement le problème envisagé. Il en résulte que nous ne pouvons pas espérer une convergence de ces résultats avec les valeurs expérimentales ; de plus il reste l'hypothèse $\vec{R} \neq \vec{\rho}$ (l'approximation en pic devant jouer un rôle relativement peu important par suite des valeurs faibles obtenues pour les sections efficaces à basse énergies). Cependant, cette étude nous permet de mettre en évidence plusieurs points importants :

• Nous avons vu que, quand la solution des états stationnaires est exacte, les résultats `` Prior ´´ et `` Post ´´ sont identiques ; par ailleurs, la théorie formelle ne permet pas de faire un choix, dans le cas de solution approchées, si les valeurs correspondantes sont différentes, ce qui est le cas de la méthode VPS. Cependant, la concordance observée pour les états 1s → ns, à la suite de notre modification, nous permet de conclure que la divergence est dûe au terme A négligé. Il en résulte que cette étude montre l'avantage de l'approximation `` Prior ´´ par rapport à l'approximation `` Post ´´ puisque, dans la première, l'importance des termes négligés est toujours la même quel que soit l'état excité considéré, alors que, dans la seconde, nous n'avons aucun moyen d'apprécier leur rôle, principalement dans les états asymétriques, toute compensation semble donc aléatoire. C'est essentiellement la raison pour laquelle, dans ce qui suit, nous n'utilisons que l'approximation `` Prior ´´.

• Les expressions des éléments de matrice, données par les relations (116a) (133), qui correspondent respectivement aux courbes (a) et (a') (c'est-à-dire à la méthode `` Prior ´´ sans et avec le terme A), sont très différentes ; ceci provient du fait que la variable z de la fonction hypergéométrique est telle que $|z| > 1$ pour (a) et $|z| < 1$ pour (a'). Or l'hypothèse de Vainshtein, Presnyakov et Sobelman /58/, qui consiste à remplacer $e^{i\vec{q}\vec{r}}$ par $e^{-i\vec{q}\vec{r}}$ dans l'intégrale exprimant les éléments de matrice pour obtenir des résultats plus en accord avec l'expérience, à le même effet sur la variable z que l'introduction du terme négligé. Ainsi, ce changement arbitraire de signe ne compense pas l'approximation en pic comme le supposent ces auteurs, mais il joue sur la seconde approximation ; il en résulte que la charge effective qu'ils introduisent dans ce but n'a plus, en fait, de signification physique.

Finalement, de tout ce qui précède on peut conclure que le rôle de l'expression A, si l'on considère $\vec{R} \# \vec{\rho}$, revient à diminuer l'énergie k_o^2 dans les équations (75a) et (75b) donc le fait de négliger ce terme a pour conséquence une surestimation du potentiel d'attraction $\frac{2}{R}$ par rapport au potentiel derépulsion. Pourcompenser cet effet, tout en conservant à la fonction d'onde approchée une forme asymptotique correcte, notre deuxième modification a consisté en l'introduction d'un facteur correctif ϵ de la charge du noyau. D'après ce qui a été vu, ce terme ϵ ne doit pas dépendre de l'état final d'excitation. Il doit être constant si la transition a pour origine l'état fondamental et sa valeur doit d'ailleurs être la même dans la méthode de Born modifiée ; ainsi il suffit de le déterminer une seule fois. Remarquons que ce raisonnement n'est plus valable avec l'approximation ``Post ´´puisque, dans ce cas, le terme ϵ doit dépendre de l'état final.

• II – ETUDE DE LA DEUXIEME MODIFICATION : INFLUENCE DU FACTEUR CORRECTIF ϵ SUR LES APPROXIMATIONS. CORRECTION DES EFFETS DE L'APPROXIMATION EN PIC ET DU POTENTIEL MODIFIE.

1) Effets du facteur correctifs ϵ –

Les sections efficaces d'excitation sont calculées numériquement par les relations (118a) et (127a) concernant respectivement les méthodes VPSM et BM pour différentes valeurs du terme ϵ. Sur la figure 7 sont représentées les transitions 1s → 2s [G_{on}(q) donné par la relation (146)] sur la figure 8, les transitions 1s → 2p [G_{on} (q) donné par la relation (149)] et sur la figure 9 l'ionisation [G_{oi} ($\vec{k}$,q) donné par la relation (157)]. Sur chacune d'elles, les courbes pointillées sont relatives

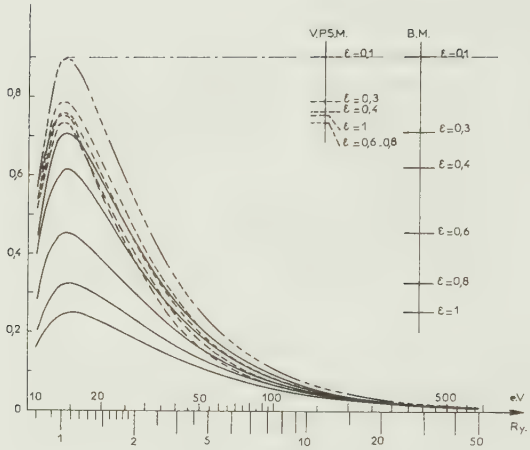

FIG. 7 — Influence du facteur ε sur $\sigma_{1s\to 2s}$

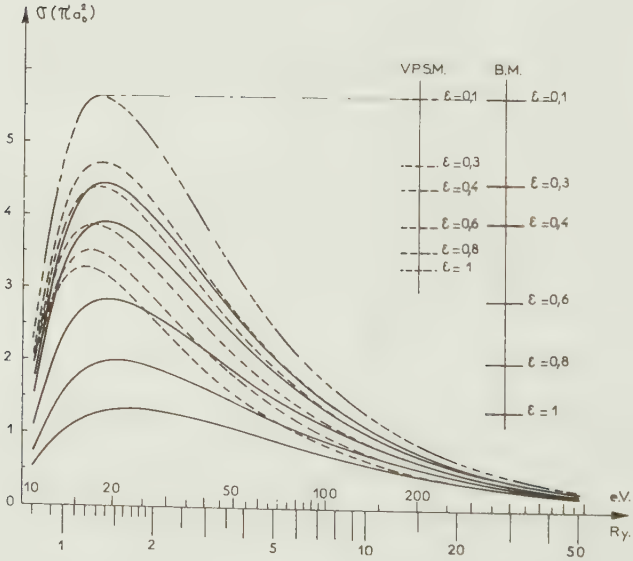

FIG. 8 — Influence du facteur ε sur $\sigma_{1s\to 2p}$

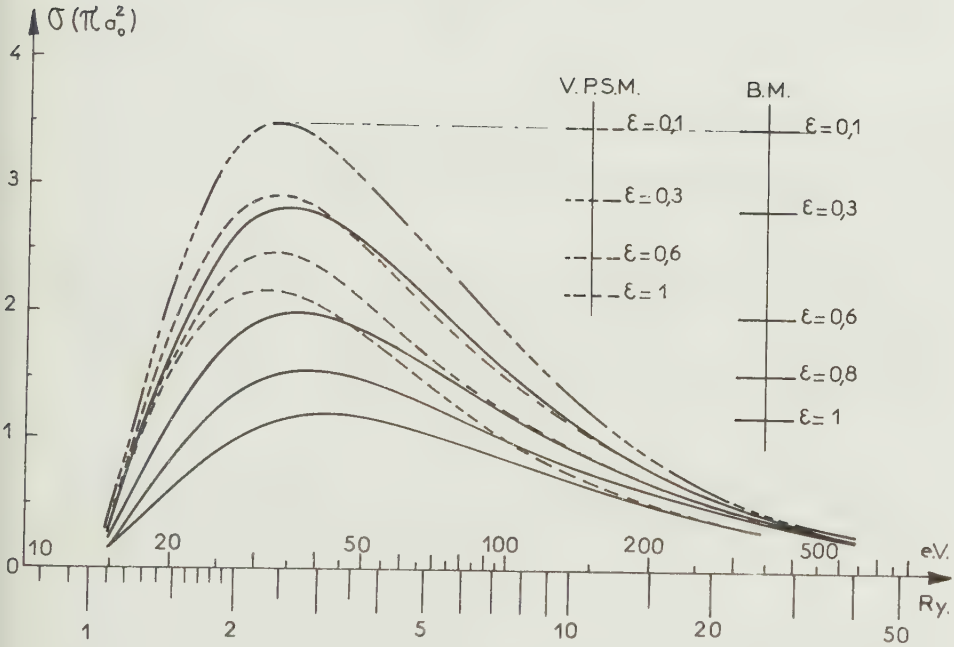

FIG. 9 — Influence du facteur ε sur $\sigma_{ionisation}$

aux résultats de la méthode VPSM et les courbes en traits pleins correspondent à ceux de la méthode BM, les différentes valeurs du facteur correctif étant indiquées dans chaque cas.

L'examen de ces courbes montre que la section efficace de BM augmente fortement aux faibles énergies quand ϵ diminue, alors qu'elle varie nettement moins pour VPSM, surtout dans le cas de la transition 1s→2s.

Pour essayer d'interpréter ces résultats, il faut revenir aux approximations faites dans chaque cas lesquelles sont, rappelons-le, les suivantes :

* le terme A [relation (72)] est négligé
* l'approximation en pic est utilisée dans les deux méthodes mais elle est relative à des fonctions d'onde différentes dans chaque cas.
* le potentiel d'attraction est approximé différemment mais de manière symétrique.

Il faut analyser leur dépendance par rapport à ϵ. Le facteur correctif, comnous l'avons vu, a été introduit pour compenser le terme A négligé, or son effet divergent par rapport aux résultats expérimentaux dans B.M. et V.P.S.M. peut être interprété comme conséquence d'une correlation défavorable entre ce terme et les deux autres approximations.

En effet, dans le cas de la méthode B.M., si l'on considère l'élément de matrice [relation 119] on constate que pour $\epsilon = 1$ ($\beta = o$), l'intégrale devient identique à celle de T_{on} de Born (63) pour laquelle on a exactement $\vec{s} = o$. Ainsi, quand ϵ reste très voisin de 1, le fait de remplacer $G_{on}(\vec{q}-\vec{s})$ par $G_{on}(\vec{q})$ ne doit pas introduire d'erreur importante par suite de la continuité analytique de la fonction ; par contre, au fur et à mesure de sa décroissance, l'approximation devient de moins en moins bonne, le domaine correspondant à $\vec{q} = \vec{s}$ prenant de plus en plus d'importance, Il en résulte que T_{on} est de plus en plus surestimé, ce qui explique l'augmentation des sections efficaces avec la méthode BM alors que l'on devrait s'attendre à ce que le facteur ϵ joue un rôle favorable conformément aux résultats du premier paragraphe. Cette conclusion est en accord avec les résultats obtenus par d'autres auteurs (/68/ et /69/) qui montrent que l'approximation en pic peut surestimer les valeurs des sections efficaces d'un facteur supérieur à deux pour les faibles énergies.

Par ailleurs, dans la méthode V.P.S.M., l'introduction du terme ϵ dans l'élément de matrice [relation 109] devrait, s'il joue un rôle sur la surestimation de l'approximation en pic, avoir un effet favorable car la fonction hypergéométrique qu'il contient tend vers l'unité quand ϵ tend vers zéro. Or ce n'est pas ce que l'on observe puisque $\sigma^V_{1s\to 2p}$ et σ^V_{oi} augmentent quand ϵ diminue, ($\sigma^V_{1s\to 2s}$ reste sensiblement constante) ce qui montre que, bien que le terme ϵ compense A, il agit dans un sens défavorable sur l'approximation relative au potentiel. Cette conslusion permet d'expliquer l'effet pondérateur de la charge effective symétrique introduite arbitrairement par Vainshtein, Presnyakov et Sobelman /58/ bien que cette amélioration conduise encore à des résultats fortement différents des valeurs expérimentales /63/. (voir figures 16 et 17).

Sur les figures 7, 8 et 9 on observe également une convergence des résultats obtenus par ces deux méthodes, les courbes étant confondues pour $\epsilon = 0,1$ (courbes mi traits pleins, mi pointillés). Ceci est justifié théoriquement par le fait que, pour $\epsilon = o$, les fonctions d'onde sont identiques [relations (97) à (103)]. De plus, bien que la fonction d'onde utilisée dans la méthode d'Impulsion soit différente de celle utilisée ici, on constate que, après les approximations nécessaires pour le calcul des élements de matrice, les formes analytiques résultantes sont identiques à celles obtenues pour $\epsilon = o$ dans la méthode B.M.

L'intérêt du paramètre ϵ, outre son rôle correctif, est donc de faire la synthèse entre les trois principales méthodes utilisées dans l'étude des collisions atomiques (V.P.S., Born, Impulsion). En effet, les fonctions d'onde utilisée dans chacune d'elles peuvent être obtenues, d'après ce qui précède, à partir de la forme générale initiale $\phi_o(\vec{r}_1)\, g\,(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, des approximations différentes étant faites ensuite pour résoudre l'équation de Schrödinger et calculer les éléments de matrice.

La conclusion est que le facteur correctif ϵ, initialement introduit pour compenser le terme A, ne permet pas d'obtenir un accord entre ces résultats et les valeurs expérimentales mais cette étude montre que la divergence peut essentiellement être attribuée à l'effet prépondérant de surestimation dû à l'approximation en pic bien que les variations de V.P.S.M. ($\sigma_{1s\to 2p}$ et ionisation) montrent que ce paramètre joue également un rôle sur le potentiel. On observe encore, sur les courbes V.P.S.M., que le taux d'accroissement de la section efficace devient de plus en plus important pour $\epsilon < o,3$ (principalement dans le cas 1s→ 2s) ce qui tend à montrer que ce paramètre ne doit pas avoir une valeur trop faible.

Dans la partie suivante, nous allons reprendre ce problème de manière différente, l'objectif principal étant alors de compenser l'approximation en pic sans cependant, d'après ce qui précède, pouvoir la scinder complètement de celle qui concerne le potentiel.

2) Correction des effets de l'approximation en pic et du potentiel modifié -

Revenons aux figures 1 et 2, l'examen des courbes (a) ($\sigma_{1s\to 2s}$ et $\sigma_{1s\to 2p}$ VPS) et (c) ($\sigma_{1s\to 2s}$ et $\sigma_{1s\to 2p}$ Born) montre qu'elles divergent notablement ; il en est de même sur la figure 12 qui correspond à l'ionisation (courbes pointillées). D'après ce qui précède, ce désaccord est dû, d'une part, à l'approximation en pic dans la méthode V.P.S. alors que les éléments de matrice sont calculés exactement chez Born, d'autre part, à l'approximation faite pour le potentiel d'attraction. Notre objectif actuel est, à l'inverse du cas précédent, d'essayer de ramener les résultats de V.P.S., dans chaque cas, sur ceux de Born. La correction nécessaire doit donc principalement compenser l'approximation en pic si nous supposons que le remplacement de $\vec{R}$ par $\vec{\rho}$, et vive versa, n'a pas une influence prépondérante.

Pour cela, revenons aux relations (118a) et (127) donnant les sections efficaces : dans l'établissement de ces expressions, il s'introduit une discontinuité d'origine mathématique sous la forme d'un facteur de phase $e^{2\pi(1-\epsilon)/k_o}$ pour $q^2 < k_o^2 - k_n^2$. Bien qu'elle n'ait pas de cause physique apparente, son effet devient de plus en plus important, pour $\epsilon =$ cte, quand l'énergie diminue et il en résulte un notable accroissement de la section efficace aux faibles énergies. C'est pourquoi, pour pondérer l'influence de cette discontinuité, nous proposons, sur la partie d'intégrale correspondante, de modifier l'hypothèse de l'approximation en pic en posant :

$$G_{on}(\vec{q} - \vec{s}) = G_{on}(\vec{q})\ e^{-\pi\theta/2k_o}$$

θ étant un facteur constant à déterminer.

Dans ce cas, les expressions des sections efficaces relatives aux méthodes V.P.S.M. et B.M. deviennent respectivement :

$$\sigma_{on}^{V} = C_V \left[e^{\pi u} \int_{k_o - k_n}^{\sqrt{k_o^2 - k_n^2} - \lambda} \frac{|G_{on}(q)|^2}{q^3} ZZ^* \, dq + \int_{\sqrt{k_o^2 - k_n^2} + \lambda}^{k_o + k_n} \frac{|G_{on}(q)|^2}{q^3} ZZ^* \, dq \right] \quad (163)$$

$$\sigma_{on}^{B} = C_B \left[e^{\pi u} \int_{k_o - k_n}^{\sqrt{k_o^2 - k_n^2} - \lambda} \frac{|G_{on}(q)|^2}{q^3} \, dq + \int_{\sqrt{k_o^2 - k_n^2} + \lambda}^{k_o + k_n} \frac{|G_{on}(q)|^2}{q^3} \, dq \right] \quad (164)$$

$$\text{avec } u = \frac{2(1-\epsilon) - \theta}{k_o} \quad (165)$$

Les figures (10) (11) et (12), relatives aux transitions 1s → 2s, 1s → 2p et à l'ionisation montrent l'effet du terme correctif θ sur les sections efficaces calculées avec la méthode V.P.S. Sur les courbes correspondantes, ce paramètre à une valeur constante indiquée dans chaque cas.

Pour $\theta = 0{,}4$, la divergence entre les résultats des méthodes V.P.S. et Born devient faible pour l'état 1s → 2p et pour l'ionisation; il faut $\theta \sim 0{,}6$ pour obtenir le même effet dans la cas de la transition 1s → 2s. Une étude de cette dernière a été faite par Gailitis / Réf. 21 page 81/qui donne, pour des énergies comprises entre 0,76 et 1,5 Rydberg, une surestimation de l'approximation en pic voisine d'un facteur deux, ce qui correspond effectivement à une valeur moyenne de $\theta \sim 0{,}6$ pour en corriger l'effet. Il est évident que ce facteur correctif est trop simple pour permettre une compensation exacte de l'approximation en pic et, en particulier, il présente l'inconvénient de diminuer quelque peu les valeurs des sections efficaces pour les hautes énergies (les fig. 1 et 2 montrent que les résultats V.P.S., Born et expérimentaux concordent pour des énergies supérieures à environ 10 Rydberg ce qui signifie que, dans ce domaine, les approximations n'ont plus d'effet sensible). Cependant, de tout ce qui précède il résulte que, puisque θ compense la surestimation de l'approximation en pic alors que ϵ permet de tenir compte des termes négligés, la conjonction de ces deux effets doit pondérer deux des trois approximations.

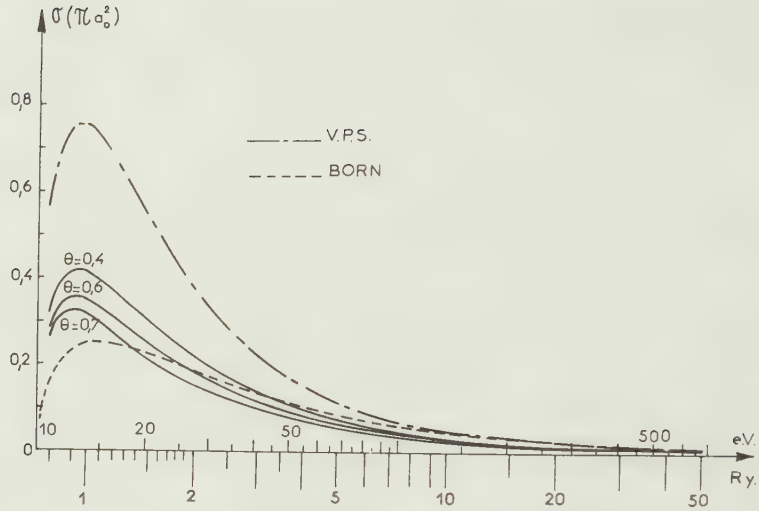

FIG. 10 — Influence du facteur θ sur $\sigma_{1s\to 2s}$ V.P.S.

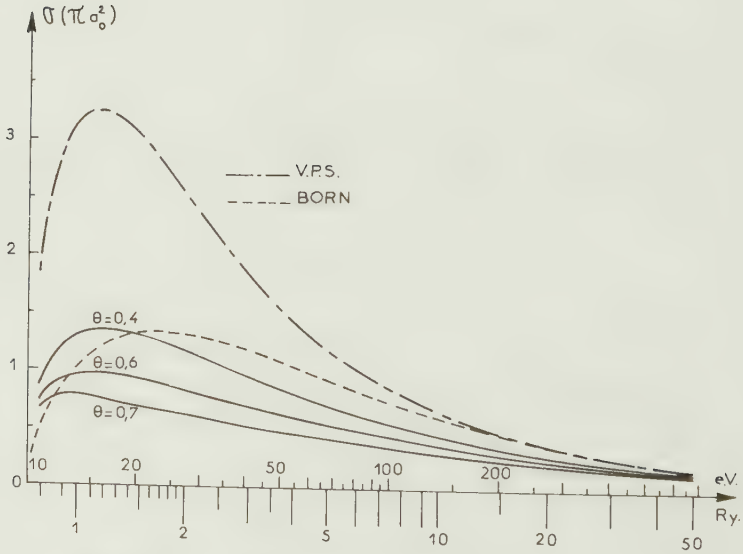

FIG. 11 — Influence du facteur θ sur $\sigma_{1s\to 2p}$ V.P.S.

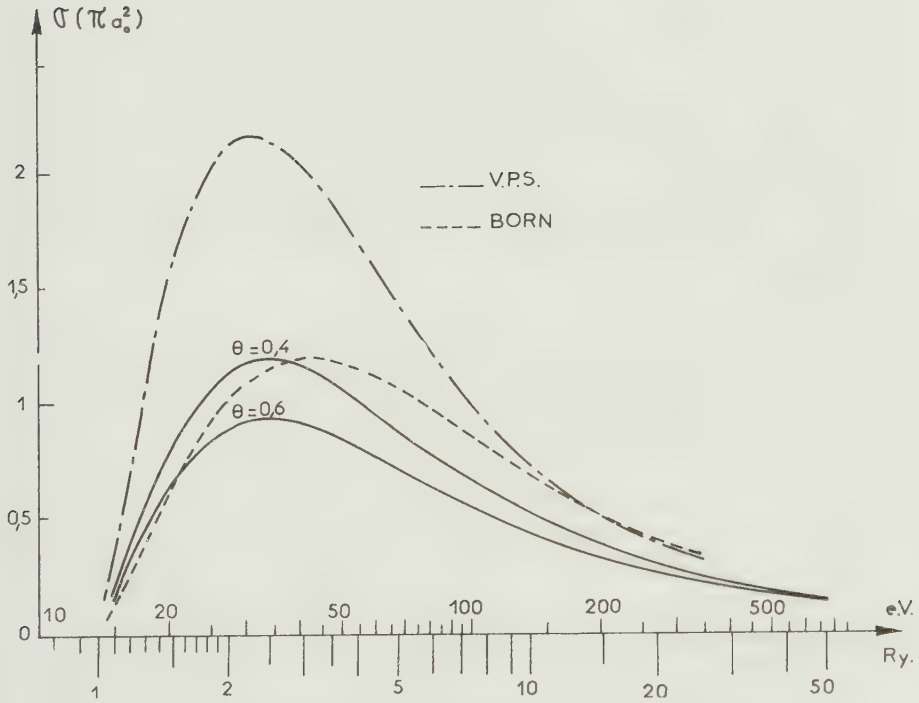

FIG. 12 — Influence du facteur θ sur $\sigma_{ionisation}$ V.P.S.

Néanmoins, la dernière, qui concerne le potentiel, ne peut pas être séparée des deux autres puisqu'elle est également influencée par ϵ, mais son effet n'est pas prépondérant tant que ϵ reste supérieur à 0,3 (fig. 7, 8 et 9 – variations de V.P.S.M. par rapport à B.M.).

On peut en conclure que si ce point de vue est exact, il doit être possible d'ajuster les résultats relatifs à chaque méthode aux valeurs expérimentales. Rappelons que le facteur ϵ doit être le même pour les approximations V.P.S.M. et B.M. puisqu'il a été introduit pour compenser les termes négligés qui sont les mêmes dans les deux cas. En ce qui concerne θ, il devrait différer pour des fonctions d'ondes distinctes, c'est-à-dire pour $\epsilon \neq$ o. Cependant, ce terme influe également sur le potentiel puisqu'il permet de ramener les valeurs numériques V.P.S. sur celles de Born alors que les potentiels respectifs sont approximés différemment. La convergence observée sur les figures 7, 8 et 9 montre que, pour $\epsilon \lesssim 0{,}5$, ces approximations jouent un rôle équivalent ce qui laisse supposer que θ ne doit pas, en fait, varier beaucoup d'un cas à l'autre. C'est effectivement ce que nous allons voir dans la partie suivante.

III – COMPARAISON DES SECTIONS EFFICACES DETERMINEES PAR LES METHODES VPSM ET BM AVEC LES RESULTATS EXPERIMENTAUX – DETERMINATION DES VALEURS NUMERIQUES DES PARAMETRES ϵ ET θ.

Dans les deux méthodes développées précédemment, deux facteur arbitraires, ϵ et θ, ont été introduits et nous nous proposons, ici, de déterminer leur influence sur les valeurs numériques des sections efficaces calculées à partir des relations (163) et (164) pour les transitions 1s→2s et 1s→2p. Les résultats précédents nous indiquent que ϵ doit être compris entre 0 et 1 sans être proche de ces bornes pour que la correction des termes négligés ne soit ni trop exagérée, ni trop sous-estimée. De plus, les figures 10, 11 et 12 donnent un ordre de grandeur du paramètre θ pour $\epsilon = 1$. Enfin, nous devons rechercher une bonne convergence des résultats avec ceux de la méthode classique de Born pour des énergies supérieures à environ150 eV ce qui limite les possibilités de variation.

Une étude numérique des transitions 1s→2s et 1s→2p, basée sur un quadrillage assez large (l'intervalle de variation de ϵ et θ est égal à 0,2) donne un premier ensemble de renseignements sur les variations des résultats. Les tableaux de valeurs numériques et les courbes correspondantes ne sont pas reproduits ici pour des raisons matérielles mais ils font l'objet d'un rapport interne /70/. Un quadrillage local plus fin (intervalle d'amplitude 0,1) permet de préciser les valeurs recherchées

(compte-tenu du manque de précision de la correction faite pour l'approximation en pic, il ne nous a pas semblé significatif de prendre un intervalle de variation des paramètres inférieur à 0,1). Les grandes lignes qui se dégagent de cette étude sont les suivantes :

Comme il fallait s'y attendre d'après ce qui précède, les deux méthodes donnent des résultats très voisins pour ϵ inférieur à 0,3 à θ constant, mais ils sont très différents des valeurs expérimentales quel que soit θ. Ce domaine est donc exclu. La divergence devient importante pour ϵ supérieur ou égal à 0,6 et elle croît avec θ pour ϵ constant, ce qui élimine également cette région. Dans ce cas, il n'existe qu'une seule possibilité de convergence des deux méthodes avec les valeurs expérimentales (pour les transitions effectivement mesurées) quelles que soient les combinaisons envisagées : pour obtenir des résultats satisfaisants il faut prendre $\epsilon = 0{,}4$ pour les deux méthodes avec $\theta = 0{,}8$ pour V.P.S.M. et $\theta = 0{,}7$ pour B.M. Les résultats correspondants sont indiqués sur les figures 13, 14 et 15, qui représentent respectivement la variation, en fonction de l'énergie, des sections efficaces d'excitation $1s \to 2s$ $1s \to 2p$ et d'ionisation, calculées pour les valeurs précédentes des paramètres ϵ et θ. La convergence avec les résultats expérimentaux, également indiqués, est remarquable principalement dans les deux derniers cas. De plus, les deux méthodes donnent des valeurs très voisines (sauf pour $1s \to 2s$ aux très faibles énergies). Ainsi, nous justifions à postériori nos hypothèses en ce qui concerne la valeur constante du facteur ϵ dans les deux théories ; de plus nous constatons que θ est constant dans chacune d'elle, quelle que soit la transition, alors qu'il diffère peu de l'une à l'autre. Ces conclusions très importantes seront entièrement confirmées dans la suite à propos de l'étude de quelques états excités pour lesquels les valeurs expérimentales ne sont pas connues. Enfin, les valeurs à haute énergie sont très voisines de celles obtenues par la méthode classique de Born.

Remarquons qu'il serait possible d'améliorer ces valeurs mais cela ne semble pas utile puisque, dans le cas présent, l'échange n'est pas introduit. De plus, la divergence observée pour $\sigma_{1s \to 2s}$ aux faibles énergies peut être interprétée comme conséquence de la trop grande simplicité de nos corrections qui, étant constantes, ne se traduisent que par des effets moyens. Enfin, la dispersion des résultats expérimentaux /54/ et /55/ indiqués sur la figure 13 montre que toute précision supplémentaire est peu significative.

Il n'est pas surprenant que θ ne dépende pas de la transition envisagée pour une méthode donnée, bien que l'étude des figures 10, 11 et 12 semble indiquer une valeur plus élevée pour l'excitation $1s \to 2s$. En effet, ces courbes sont tracées pour $\epsilon = 1$ et il faut tenir compte de la variation de ce terme, ce qui peut être fait en

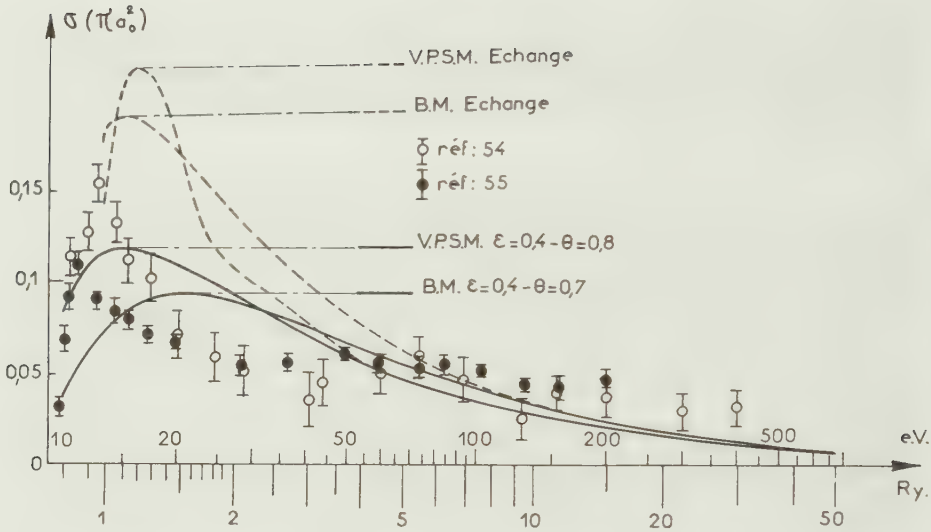

FIG. 13 — Valeurs de $\sigma_{1s\to 2s}$ calculées par B.M. et V.P.S.M.

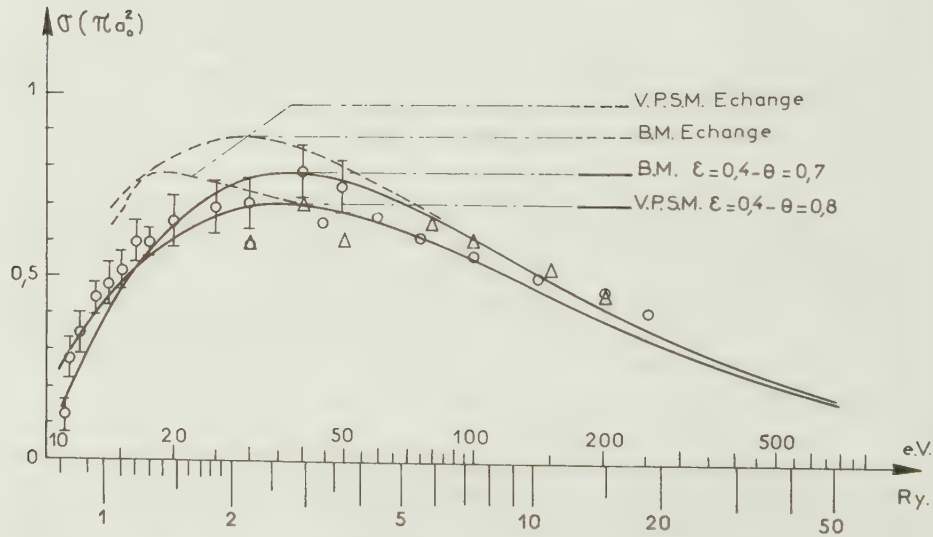

FIG. 14 — Valeurs de $\sigma_{1s\to 2p}$ calculées par B.M. et V.P.S.M.

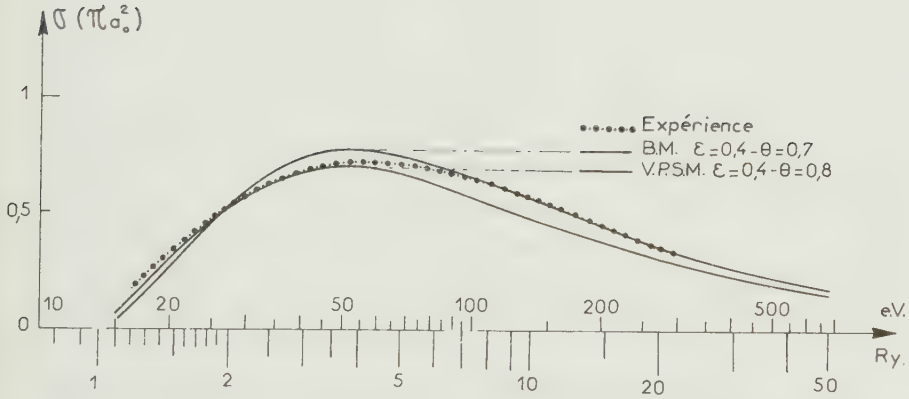

FIG. 15 — Valeur de $\sigma_{ionisation}$ calculée par B.M. et V.P.S.M.

se reportant aux figures 7, 8 et 9. Sur ces dernières, on observe que les valeurs de la transition 1s →2s ne sont que peu influencées par ϵ alors que ce n'est plus le cas pour 1s →2p et l'ionisation qui varient dans un sens défavorable quand ϵ décroît. Ces résultats indiquent que l'effet néfaste de ce paramètre sur les autres approximations est plus important dans ces deux derniers cas d'où la nécessité d'une compensation plus important, c'est-à-dire d'une valeur plus élevée de θ que celle qui est nécessaire dans le cas correspondant à $\epsilon = 1$.

En conclusion, la convergence de chaque méthode, d'une part avec les résultats expérimentaux connus, d'autre part entre elles, montre que les approximations sont compensées de manière satisfaisante, ce qui n'est pas fortuit puisque la concordance subsiste pour les états excités comme nous allons le voir dans la suite. Par ailleurs, tout l'intérêt de ces deux méthodes est mis en évidence sur les figures 16 et 17 qui donnent, respectivement dans le cas des transitions 1s → 2s et 1s → 2p, les résultats des principales théories antérieures comparés à ceux de V.P.S.M. et B.M. et aux valeurs expérimentales. L'examen des courbes correspondantes montre que ce sont nos valeurs qui sont les plus proches des mesures, ceci restant encore vérifié dans le cas de l'ionisation. (Nous ne donnons pas de figure correspondant à l'ionisation pour les résultats relatifs à ces différentes méthodes car, dans la plupart des cas, les valeurs numériques ne sont pas publiées). Par ailleurs, dans les méthodes antérieures il arrive que la convergence puisse être assez favorable pour une transition donnée, ce qui est par exemple le cas de $\sigma_{1s\to 2s}$ calculée avec la méthode ``Post'' par Crothers /60/ comme on le voit sur la figure 16, mais alors on remarque toujours que la théorie n'est valable que pour une seule transition [dans l'exemple précédent, la méthode ``Post'' donne de mauvais résultats pour $\sigma_{1s\to 2p}$ à basse énergie (figure 17)] ce qui n'est absolument pas le cas ici puisque la convergence existe entre les trois seuls états expérimentalement étudiés. De plus, les deux approximations donnent des résultats voisins dans les différents états excités qui ont été calculées.

IV – INTRODUCTION DE L'ECHANGE DANS LES METHODES VPSM ET BM.

1) Expressions de la section efficace totale relatives à V.P.S.M. et B.M. –

Les calculs faits précédemment ne concernent que T^d_{on} correspondant aux relations (116a) ou (124) suivant la méthode considérée. Cependant, nous avons vu, dans la première partie, que l'électron incident peut venir se placer sur une orbitale atomique alors que l'électron qui s'y trouvait est éjecté. Il y a donc échange de ces deux corpuscules et c'est ce cas, plus général, qui va être étudié dans la suite. La

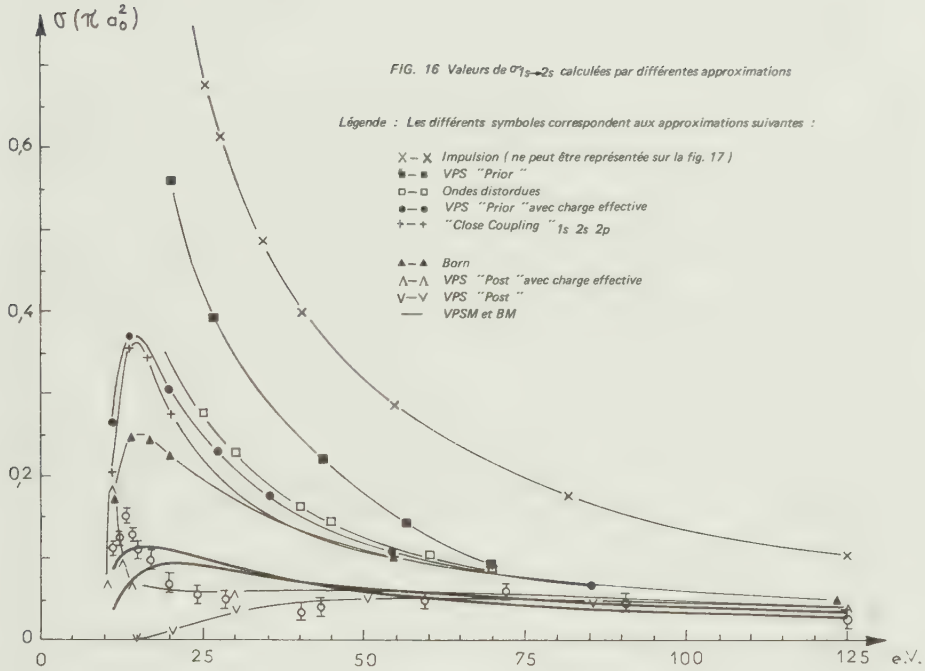

FIG. 16 — Valeurs de $\sigma_{1s\to 2s}$ calculées par différentes approximations

Légende : les différents symboles correspondent aux approximations suivantes :

x – x	*Impulsion*
■ – ■	*VPS "Prior"*
□ – □	*Ondes distordues*
● – ●	*VPS "Prior" avec charge effective*
+ – +	*"Close Coupling"* 1s–2s–2p
▲ – ▲	*Born*
Λ – Λ	*VPS "Post" avec charge effective*
V – V	*VPS "Post"*
——	*VPSM et BM*

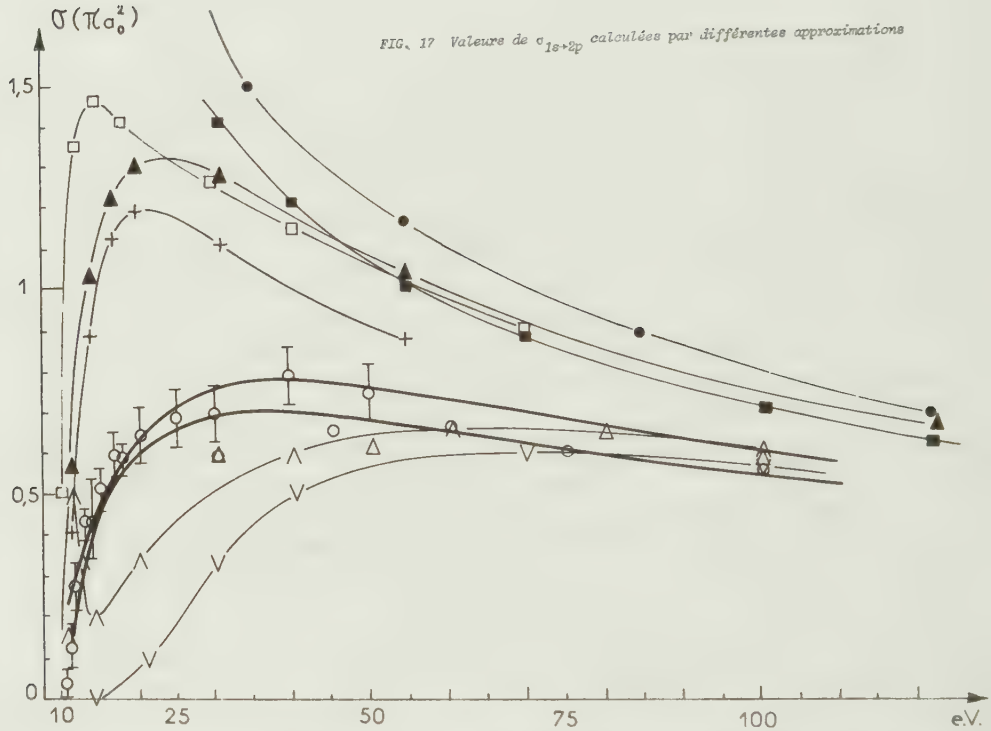

FIG. 17 — Valeurs de $\sigma_{1s\to 2p}$ calculées par différentes approximations

Légende : les différents symboles correspondent aux approximations suivantes :

x — x	*Impulsion (ne peut être représentée sur la fig. 17)*
■ — ■	*VPS "Prior"*
□ — □	*Ondes distordues*
● — ●	*VPS "Prior" avec charge effective*
+ — +	*"Close Coupling" 1s–2s–2p*
▲ — ▲	*Born*
Λ — Λ	*VPS "Post" avec charge effective*
V — V	*VPS "Post"*
—	*VPSM et BM*

section efficace totale d'excitation est alors donnée par la relation générale (60) qui peut se mettre sous la forme suivante :

$$\sigma_{on} = \frac{1}{2\pi k_o^2} \left[\int_{k_o - k_n}^{k_o + k_n} \left(|T^d_{on}|^2 + |T^2_{on}|^2 - \mathrm{Re}\,(T^d_{on} \,.\, T^{e*}_{on}) \right] q dq \quad (166)$$

laquelle est mieux adaptée aux calculs numériques. Dans cette expression Re représenté la partie réelle de l'expression considérée.

Le développement mathématique étant le même pour les méthodes VPSM et BM, nous n'ailons le détailler que pour la première, la seconde s'en déduisant de façon analogue. Le terme T^e_{on}, donné par la relation (53a), s'écrit en tenant compte de l'expression (97)

$$T^e_{on} = N_V \int \phi^*_n (\vec{r}_2)\, e^{-i\vec{k}_n \vec{r}_1}\, \hat{V}'\, \phi_o (\vec{r}_1)\, e^{i\vec{k}_o \vec{r}_2}\, F\left(\frac{i\epsilon}{k_o} ; 1 ; ik_o R - i\vec{k}_o \vec{R} \right) .$$

$$F\left(\frac{-i}{k_o} ; 1 ; ik_o \rho - i\vec{k}_o \vec{\rho} \right) d\tau_1\, d\tau_2 \quad (167)$$

comme dans le cas des collisions directes, on prend le potentiel d'interaction de la forme :

$$V' = \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|}$$

La relation (167) devient donc :

$$T^e_{on} = \frac{4N_V}{(2\pi)^6} \int g_o (\vec{s}_1)\, g^*_n (\vec{s}_2)\, d\vec{s}_1\, d\vec{s}_2 \int e^{i(\vec{s}_1 - \vec{s}_2 + \vec{q})\vec{R}}\, F\left(\frac{i\epsilon}{R} ; 1 ; ik_o R - i\vec{k}_o \vec{R} \right) d\vec{R}$$

$$\int \frac{1}{\rho}\, e^{i(-\vec{s}_1 - \vec{s}_2 + \vec{k}_o + \vec{k}_n)\vec{\rho}}\, F\left(\frac{-i}{k_o} ; 1 ; ik_o \rho - i\vec{k}_o \vec{\rho} \right) d\vec{\rho} \quad (168)$$

Les termes $g_o (\vec{s}_1)$ et $g^*_n (\vec{s}_2)$ sont les transformées de Fourier des états atomiques $\phi_o (\vec{r}_1)$ et $\phi^*_n (\vec{r}_2)$ soit :

$$\phi_j (\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int g_j (\vec{s})\, e^{i\vec{s}\vec{r}}\, d\vec{s} \quad (169)$$

L'expression (168) ne peut pas être calculée exactement aussi tenons-nous compte du fait que, pour $\vec{s}_1 - \vec{s}_2 + \vec{q} = o$, l'intégrale en $\vec{R}$ devient infinie ce qui nous permet de poser $g_o(\vec{s}_1) \approx \vec{g}_o(\vec{s}_2 - \vec{q})$. (170)

L'intégrale en $\vec{s}_1$ peut alors être calculée en l'on a :

$$\int e^{i\vec{s}_1(\vec{R}-\vec{\rho})} ds_1 = (2\pi)^3 \quad \delta(\vec{R} - \vec{\rho}) \qquad (171)$$

Nous obtenons ainsi l'expression approchée de l'élément de matrice relatif à l'échange, soit :

$$(T^e_{on})_V = \frac{4N_V}{(2\pi)^3} \underset{\lambda \to 0}{\text{limite}} \int g_o(\vec{s}_2 - \vec{q})\, g^*_n(\vec{s}_2)\, d\vec{s}_2 \int \frac{e^{2i(\vec{k}_o - \vec{s}_2)\vec{r} - 2\lambda r}}{r} \cdot$$

$$F\left(\frac{i\epsilon}{k_o} ; 1 ; ik_o r - i\vec{k}_o\vec{r}\right) F\left(\frac{-i}{k_o} ; 1 ; ik_o r - i\vec{k}_o\vec{r}\right) d\vec{r} \qquad (172)$$

Pour calculer cette intégrale, nous reprenons l'hypothèse introduite par les auteurs de la méthode VPS qui négligent le facteur $2i\vec{s}_2$ devant $2i\vec{k}_o$, ce qui n'est pas justifié pour les faibles énergies de l'électron incident. Nous obtenons finalement :

$$(T^e_{on})_V = 4N_V\, G_{on}(q) \underset{\lambda \to 0}{\text{limite}} \int \frac{e^{2i\vec{k}_o\vec{r} - 2\lambda r}}{r} F\left(\frac{i\epsilon}{k_o} ; 1 ; ik_o r - i\vec{k}_o\vec{r}\right) \cdot$$

$$F\left(\frac{-i}{k_o} ; 1 ; ik_o r - i\vec{k}_o\vec{r}\right) d\vec{r} \qquad (173)$$

En reprenant ces calculs avec la fonction d'onde BM donnée par la relation (103), il vient :

$$(T^e_{on})_B = 4N_B\, G_{on}(q) \int \frac{e^{2i\vec{k}_o\vec{r}}}{r}\; F\left(\frac{-i\beta}{2k_o}\,;1\,;ik_o r - i\vec{k}_o\vec{r}\right) d\vec{r} \qquad (174)$$

Dans le calcul des intégrales des expressions (173) et (174) nous obtenons des expressions de la forme $(\frac{u}{v})^{i\alpha}$ dans lesquelles $v \to \infty$, ce qui conduit à une indétermination. Mais celle-ci peut être levée si nous ne négligeons plus la masse de l'électron par rapport à celle du noyau, hypothèse qui avait toujours été utilisée dans les calculs précédents. Dans ce cas, les fonctions d'onde des méthodes VPSM et BM s'écrivent respectivement /59/ :

$$g^V_o(\vec{R},\vec{\rho}) = N_V\, e^{i(b\vec{k}_o\vec{R} + \frac{2b}{\mu}\vec{k}_o\vec{\rho})}\; F\left(\frac{-i\mu}{2bk_o}\,;1\,;\frac{i2b}{\mu}k_o\rho - \frac{i2b}{\mu}\vec{k}_o\vec{\rho}\right).$$

$$F\left(\frac{i\epsilon\mu}{2bk_o}\,;1\,;ibk_oR - ib\vec{k}_o\vec{R}\right) \qquad (175)$$

$$g^B_o(\vec{R},\vec{\rho}) = N_B\, e^{i(b\vec{k}_o\vec{R} + \frac{2b}{\mu}\vec{k}_o\vec{\rho})}\; F\left(\frac{-i\mu\beta}{2bk_o}\,;1\,;\frac{i2b}{\mu}k_o\rho - \frac{i2b}{\mu}\vec{k}_o\vec{\rho}\right)$$

(176)

avec : $b = \dfrac{M}{M+1}$; $\mu = \dfrac{2M}{M+2}$

où M représente la masse du noyau exprimée en unité de masse de l'électron.

L'état final non perturbé s'écrit :

$$\phi_n(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \phi_n(\vec{r}_2)\; e^{i\vec{k}_o\vec{\sigma}} \qquad (177)$$

ici $\vec{\sigma}$ représente la position de l'électron incident, qui a pris la place de l'électron atomique, repérée par rapport au centre de masse des deux autres particules, soit :

$$\vec{\sigma} = \vec{b}\,\vec{r}_2 + \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \qquad (178)$$

$$(T^e_{on})_V = 4N_V\, G_{on}(q) \int \frac{e}{r}$$

$$F\left(\frac{-i\mu}{2bk_o}\,;1\,;\frac{i2b}{\mu}k_o r - \frac{i2b}{\mu}\vec{k}_o\vec{r}\right) F\left(\frac{i\epsilon\mu}{2bk_o}\,;1\,;ibk_o r - ib\vec{k}_o\vec{r}\right) d\vec{r} \qquad (179)$$

L'intégrale dans la relation (179) a pour valeur :

$$\frac{\pi Z_e}{k_o^2}\left[\frac{2k_o^2}{A_1 k_o^2 + B_1 k_n^2 + C_1 q^2}\right]^{\frac{i\epsilon}{k_o}}\left[\frac{2k_o^2}{A_2 k_o^2 + B_2 k_n^2 + C_2 q^2}\right]^{-i/k_o} \qquad (180)$$

Le calcul numérique des coefficients donne :

$$B_1 \# B_2 \# - C_1 \# - C_2 \# - A_2 = K \qquad (K>0)$$

De plus, K est négligeable par rapport á A_1 ($A_1>0$) ce qui nous permet de mettre la relation (180) sous la forme :

$$(T^e_{on})_V = 4N_V\, G_{on}(q)\,\frac{\pi}{k_o^2}\, Z_e \left(\frac{2}{A_1}\right)^{i\epsilon/k_o}\left[\frac{2k_o^2}{K(-k_o^2 + k_n^2 - q^2)}\right]^{-i/k_o} \qquad (181)$$

$$= 4N_V\, G_{on}(q)\,\frac{\pi}{k_o^2}\, Z_e\, e^{i/k_o\left[\epsilon \log\frac{2}{A_1} - \log\left|\frac{2k_o^2}{K(-k_o^2+k_n^2-q^2)}\right|\right] + \frac{\pi}{k_o}} \qquad (182)$$

où Z_e a pour expression :

$$Z_e = (-z)^{i/k_o}\,\frac{\Gamma\left(\frac{2}{k_o} + \frac{i\epsilon}{k_o}\right)}{\Gamma\left(\frac{i\epsilon}{k_o}\right)\Gamma\left(1 + \frac{i}{k_o}\right)} + (-z)^{-i\epsilon/k_o}\,\frac{\Gamma\left(\frac{-i}{k_o} - \frac{i\epsilon}{k_o}\right)}{\Gamma\left(\frac{-i}{k_o}\right)\Gamma\left(1 - \frac{i\epsilon}{k_o}\right)} \qquad (183)$$

$$\text{avec} \quad z = \frac{-4k_o^2}{A_1 K (q^2 + k_o^2 - k_n^2)} \qquad (184)$$

En remplaçant les valeurs des éléments de matrice donnés par les relations (116a) et (181) dans la relation (166), nous obtenons la section efficace totale d'excitation de la méthode VPSM, soit :

$$\sigma_{on}^{V} = C_V \Bigg[e^{\pi\left(\frac{2-2\epsilon-\theta}{k_o}\right)} \int_{k_o - k_n}^{\sqrt{k_o^2 - k_n^2} - \lambda} \frac{|G_{on}(q)|^2}{q^3} ZZ^* \, dq + \int_{\sqrt{k_o^2 - k_n^2} + \lambda}^{k_o + k_n} \frac{|G_{on}(q)|^2}{q^3} ZZ^* \, dq$$

$$+ \frac{e^{\pi(2-\theta)/k_o}}{k_o^4} \left(\int_{k_o - k_n}^{\sqrt{k_o^2 - k_n^2} - \lambda} |G_{on}(q)|^2 \, Z_e Z_e^* \, q dq + \int_{\sqrt{k_o^2 - k_n^2} + \lambda}^{k_o + k_n} |G_{on}(q)|^2 \, Z_e Z_e^* \, q dq \right)$$

$$- \frac{e^{\pi(1-\theta/2)/k_o}}{k_o^2} \left(e^{\frac{\pi(1-\epsilon-\theta/2)}{k_o}} \int_{k_o - k_n}^{\sqrt{k_o^2 - k_n^2} - \lambda} \frac{|G_{on}(q)|^2}{q} h(q) \, dq + \int_{\sqrt{k_o^2 - k_n^2} + \lambda}^{k_o + k_n} \frac{|G_{on}(q)|^2}{q} h(q) \, dq \right) \Bigg] \qquad (185)$$

$$\text{avec } h(q) = \cos v \, (\mathrm{ReZ.ReZe} + \mathrm{ImZ.ImZe}) - \sin v \, (\mathrm{ImZ.ReZe} - \mathrm{ReZ.ImZe}) \qquad (186)$$

$$\text{et} \quad v = \frac{1}{k_o} \left[(\epsilon - 1) \log \left| \frac{q^2}{q^2 - k_o^2 + k_n^2} \right| - \epsilon \log \left| \frac{2}{A_1} \right| + \log \left| \frac{2k_o^2}{K(-k_o^2 + k_n^2 - q^2)} \right| \right] \qquad (187)$$

D'une manière analogue, on calcule l'expression de T^e_{on} dans la méthode BM ce qui donne :

$$(T^e_{on})_B = 4N_B\, G_{on}(q)\, \frac{\pi}{k_o^2}\, e^{\frac{-i\beta}{2k_o}} \log\left|\frac{2k_o^2}{K(-k_o^2+k_n^2-q^2)}\right| + \frac{\pi\beta}{2k_o} \qquad (188)$$

En tenant compte des relations (124), (166) et (188) la section efficace totale d'excitation devient :

$$\sigma^B_{on} = C_B \left[e^{\frac{\pi(2-2\epsilon-\theta)}{k_o}} \int_{k_o-k_n}^{\sqrt{k_o^2-k_n^2}-\lambda} \frac{|G_{on}(q)|^2}{q^3}\, dq + \int_{\sqrt{k_o^2-k_n^2}+\lambda}^{k_o+k_n} \frac{|G_{on}(q)|^2}{q^3} \right.$$

$$+ \frac{e^{\frac{2\pi(1-\epsilon-\theta/2)}{k_o}}}{k_o^4} \left(\int_{k_o-k_n}^{\sqrt{k_o^2-k_n^2}-\lambda} |G_{on}(q)|^2\, q dq + \int_{\sqrt{k_o^2-k_n^2}+\lambda}^{k_o+k_n} |G_{on}(q)|^2\, q dq \right.$$

$$- \frac{e^{\frac{\pi(1-\epsilon-\theta/2)}{k_o}}}{k_o^2} \left(e^{\frac{\pi(1-\epsilon-\theta/2)}{k_o}} \int_{k_o-k_n}^{\sqrt{k_o^2-k_n^2}-\lambda} \frac{|G_{on}(q)|^2}{q} \cos u\, dq \right.$$

$$\left.\left.\left. + \int_{\sqrt{k_o^2-k_n^2}+\lambda}^{k_o+k_n} \frac{|G_{on}(q)|^2}{q} \cos u\, dq \right)\right]\right. \qquad (189)$$

$$\text{avec } u = \frac{(1-\epsilon)}{k_o} \left[\log\left|\frac{2k_o^2}{K(-k_o^2+k_n^2-q^2)}\right| - \log\left|\frac{2q^2}{q^2-k_o^2+k_n^2}\right| \right] \qquad (190)$$

Dans ces expressions donnant les sections efficaces σ^V_{on} pour VPSM et σ^B_{on} pour BM, il faut encore remplacer les G_{on} (q) par les valeurs correspondant aux transitions envisagées.

2) Résultats numériques et discussion -

Les calculs numériques sont effectués en utilisant les expressions (185) et (189), le paramètre θ étant introduit de la même manière que dans T^d_{on} pour atténuer l'effet du facteur de phase. Les résultats sont indiqués dans les tableaux placés en annexe, les valeurs de $(T_{on})_d$ étant rappelées dans chaque cas, et les courbes relatives dues aux transitions $1s \rightarrow 2s$ et $1s \rightarrow 2p$ sont représentées sur les figures 13 et 14 (parties pointillées).

On observe que l'introduction de l'échange ne modifie pratiquement pas les résultats pour des énergies supérieures à 3 Ry. Aux faibles énergies, les sections efficaces augmentent (l'accroissement est surtout important dans le cas des transitions s-s) mais cet effet n'est pas significatif puisque, par rapport au calcul de T^d_{on}, nous avons introduit une approximation supplémentaire qui n'est plus justifiée dans la région où la divergence apparaît. En effet, dans l'expression des éléments de matrice donnée par la relation (172) nous avons négligé $2i\vec{s}_2$ devant $2i\vec{k}_o$ pour calculer l'intégrale. Or, la relation (169) montre que $\vec{s}_2$ est lié à la quantité de mouvement de l'électron atomique qui est faible (de l'ordre de 1 Ry.). Ainsi, quand la quantité de mouvement $\vec{k}_o$ de l'électron incident est grande par rapport à celle de l'électron atomique, l'approximation faite est valable, ce que confirment les résultats numériques et le calcul du terme d'échange comme on le constate sur les deux tableaux numériques annexés. D'après ce qui précède, la limite de l'énergie correspondante se situe globalement au voisinage de 3 Ry. Pour des énergies plus faibles, au lieu de supposer que $\vec{s}_2 = o$ on peut admettre que $\vec{s}_2 \simeq \vec{k}_n$ puisque ce terme est également faible dans ce cas. Avec cette hypothèse, la relation (172) relative à T^e_{on} devient alors identique à l'expression(111), dans le cas VPSM, ce qui montre que $T^e_{on} \simeq T^d_{on}$. Il en résulte que la relation (60), donnant la section efficace d'excitation avec échange, devient identique à l'expression (46) concernant la section efficace directe d'excitation. Aux faibles énergies l'échange doit donc jouer un rôle négligeable et les résultats restent les mêmes. Cette discussion montre que, en effet, l'introduction de l'échange ne fait pas varier beaucoup les résultats. Cependant, il reste un domaine d'énergie compris entre environ 2 et 3 Ry. ou ni l'une ni l'autre de ces hypothèses

n'est justifiée, néanmoins la continuité analytique de la fonction représentant la section efficace, pour chaque transition, permet d'admettre que, sur ce relativement faible intervalle, la divergence ne peut être prépondérante. La discussion précédente s'applique aux deux méthodes.

On peut raisonnablement en conclure que les calculs effectués avec les relations donnant les sections efficaces directes restent valables, à une faible dispersion près, aux basses énergies. Cette discussion est confirmée par l'introduction de l'échange dans les cinq états excités étudiés dans la partie suivante. Les conclusions de cette étude semi-qualitative sont en accord avec les résultats obtenus par l'introduction de l'échange dans la méthode de Born, par l'approximation d'Ochkur /44/ puisque les calculs correspondants faits par Inokuti /45/ montrent une faible diminution des valeurs ($< 10\%$) pour les transitions 1s→2s et 1s→2p dans l'intervalle $1 < k_o^2 < 6$.

V – ETUDE DE QUELQUES ETATS EXCITES.

Nous avons vu que les deux approximations VPSM et BM donnent des résultats équivalents, en bon accord avec les valeurs expérimentales, pour $\epsilon = 0{,}4$ et soit $\theta = 0{,}8$ dans le premier cas, soit $\theta = 0{,}7$ dans le second. La convergence est très bonne pour la transition 1s→2p et pour l'ionisation aussi peut-on se demander ce qu'il en est entre ces deux états extrêmes ? Pour apporter des éléments de réponse à cette question nous avons calculé, par ces deux méthodes, avec les valeurs précédentes de θ et ϵ, les sections efficaces d'excitations (relations 163 et 164) pour les transitions suivantes : 1s→3s, 1s→4s, 1s→3p, 1s→4p, 1s→3d (les $G_{on}(\vec{q})$ correspondants étant donnés respectivement par les relations (147) à (152) . Les résultats numériques sont représentés sur les figures 18 à 22, comme il n'existe aucune détermination expérimentale pour ces transitions, nous avons également indiqué (en traits pointillés) les valeurs calculées par la méthode classique de Born (relation 66) qui est la seule utilisée dans ces cas bien que l'on sache qu'elle donne des valeurs trop élevées à basse énergie ($\lesssim 10$ Ry). Sur ces figures, on constate que l'accord entre les deux méthodes reste remarquable, principalement pour les états asymétriques, de plus, les valeurs sont inférieures à celles de Born ce qui semblerait indiquer, si les considérations faites sur cette méthode dans les cas expérimentalement connus restent valables, que nos résultats donnent une meilleure approximation.

Les sections efficaces relatives à ces différentes transitions ont également été calculées par les méthodes VPSM et BM en considérant l'échange (relation 185 et 189), les courbes correspondantes ne sont pas tracées mais les valeurs sont indiquées sur les tableaux mis en annexe. Les résultats confirment ceux concernant les

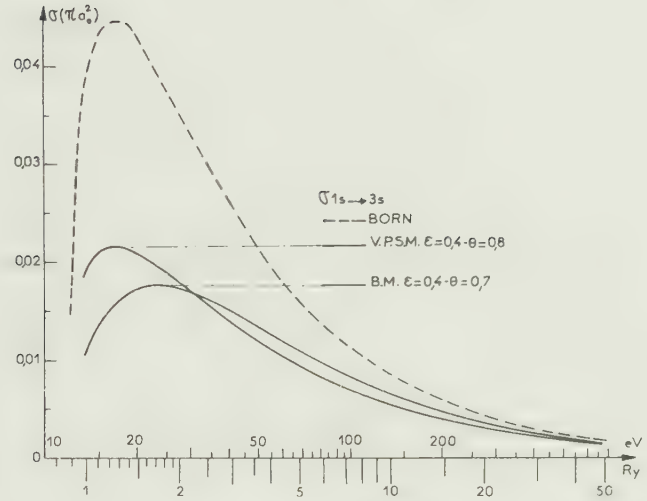

FIG. 18 — Variations de $\sigma_{1s\to 3s}$ calculées par Born, BM et VPSM

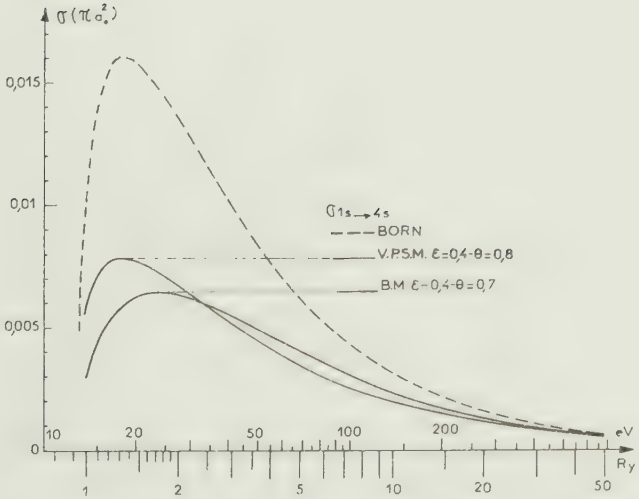

FIG. 19 — Variations de $\sigma_{1s\to 4s}$ calculées par Born, BM et VPSM

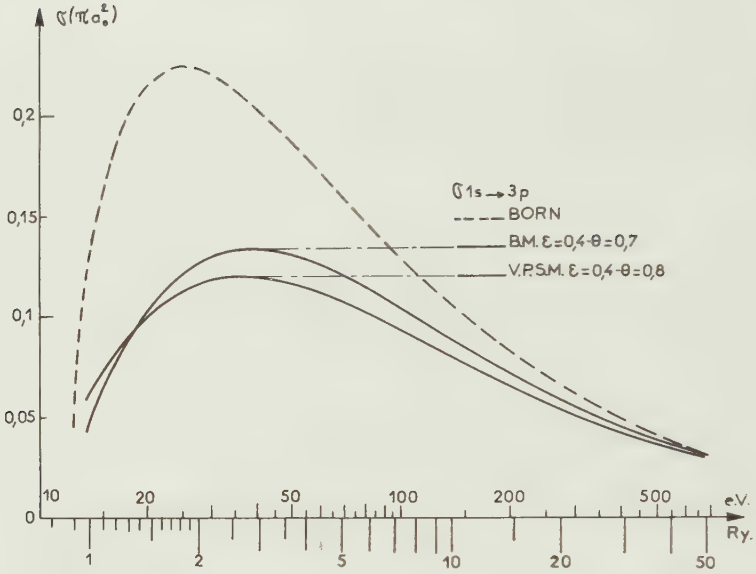

FIG. 20 — Variations de $\sigma_{1s\to 3p}$ calculées par Born, BM et VPSM

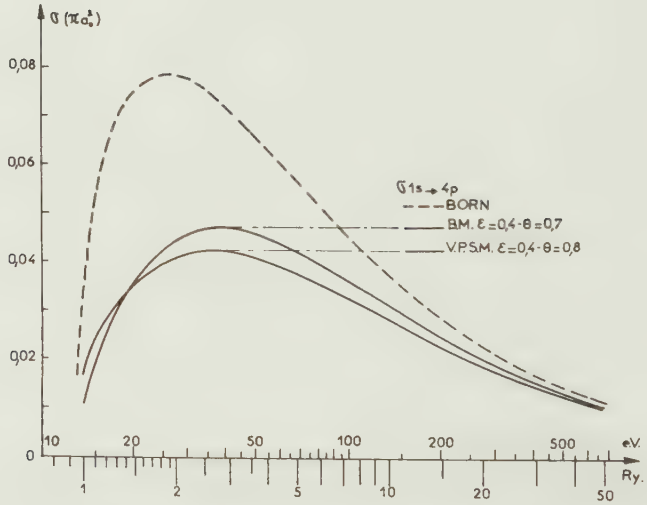

FIG. 21 — Variations de $\sigma_{1s\to 4p}$ calculées par Born, BM et VPSM

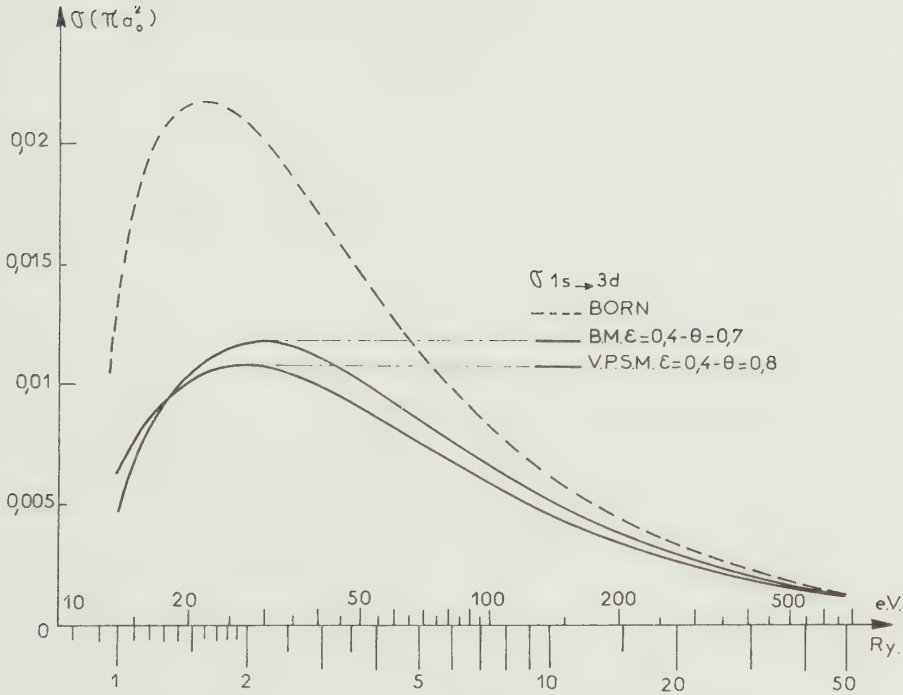

FIG. 22 — Variations de $\sigma_{1s\to 3d}$ calculées par Born, BM et VPSM

transitions 1s→2s et 1s→2p, l'accord restant bon pour des énergies supérieures ou égales à 3.Ry., il subsiste même pour des énergies inférieures dans certains cas. (1s→3p et 1s→3d). Ceci tend donc à confirmer la validité des résultats obtenus par les méthodes VPSM et BM.

En conclusion, il semble très peu probable que la correction des différentes approximations (qui ont lieu sur des fonctions différentes dans chaque cas) par les facteurs ϵ et θ puisse être fortuite car, s'il en était ainsi, la convergence ne subsisterait pas dans les différentes transitions étudiées.

CONCLUSION

Les méthodes utilisées actuellement pour calculer théoriquement les sections efficaces d'interaction électron atome d'Hydrogène donnent des résultats en désaccord avec les mesures expérimentales pour des énergies de l'électron incident inférieures à environ 150 eV. Comme nous l'avons vu, la principale difficulté provient du fait que l'équation de Schrödinger du système n'est pas analytiquement soluble. Par ailleurs, quand la solution approximée est obtenue, il subsiste d'importants problèmes d'ordre mathématique dans le calcul des éléments de matrice qui exige de nouvelles approximations. C'est ce qui explique l'imprécision de toutes ces méthodes.

Le travail actuel permet de dégager une première conclusion importante qui est la suivante : partant de la forme générale de fonction d'onde $\phi_0(\vec{r}_1)\, g\,(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, *après avoir mis au point deux méthodes modifiées, nous arrivons en donnant différentes valeurs au facteur* ϵ *et à la suite de différentes approximations sur le potentiel, à retrouver les fonctions d'ondes des trois principales méthodes (Born, VPS et Impulsions) utilisées dans les collisions atomiques ce qui permet de connaître l'importance des approximations faites dans chacune d'elles et de les comparer. Outre l'intérêt synthétique du paramètre* ϵ, *ceci montre que ce n'est finalement pas la forme analytique de la solution approchée de l'équation de Schrödinger qui est prédominante si celle-ci conduit à des résultats dénaturés par suite des approximations nécessaires pour calculer les sections efficaces. C'est donc essentiellement ces dernières qui sont prépondérantes. Or cette étude présente l'avantage de bien mettre en évidence le rôle de chacune d'elles. De plus, elle montre qu'elles ne sont pas indépendantes les unes des autres et qu'il semble peu probable que l'on puisse les corriger séparément. Cependant, leur interdépendance se traduit par des effets moyens qui sont compensés ici par l'introduction de deux facteurs correctifs simples et constants ce qui permet de ne les déterminer qu'une seule fois en ayant recours aux valeurs expérimentales. Une étude mathématique de la fonction* $\sigma(\epsilon, \theta)$ *permettrait probablement d'envisager le problème différemment mais sa*

complexité, par rapport à ses avantages, justifie la procédure utilisée ici. En effet, les deux paramètres ϵ et θ sont manifestement trop simples pour corriger correctement et complètement toutes les approximations. C'est ce qui peut expliquer l'accord moins bon des transitions 1s → ns. En particulier, on peut raisonnablement supposer que le facteur ϵ devrait dépendre de l'énergie de l'électron incident et que θ devrait être lié à l'état du système et, en ce domaine, le travail reste à faire. Nous avons fait quelques tentatives pour donner à ϵ une forme analytique $\epsilon(k)$ mais elles ne se sont pas révélées entierèment satisfaisantes, principalement en raison du fait que, à haute énergie, on doit retrouver les valeurs de Born ce qui est bien le cas avec ϵ constant. De plus, il est théoriquement possible de s'affranchir de l'approximation en pic en effectuant le calcul numérique de l'intégrale correspondante mais, outre le fait qu'elle dépend de chaque transition, ce problème exige des moyens de calculs numérique très importants comme le signalent Kyle et Omidvar /67/. Notre méthode montre l'importance relative de chaque approximation ce qui conduit à une meilleure compréhension du problème et la correction moyenne présente l'avantage de la simplicité.

Un autre point important est le suivant : la conjonction de toutes ces approximations tend à montrer que si l'accord entre la théorie et l'expérience est réalisé de manière fortuite pour une excitation donnée, il est très peu probable qu'il subsiste pour les autres or, dans notre cas, il est satisfaisant pour les trois transitions expérimentalement mesurées ce qui semblerait montrer qu'il reste acquis entre 1s → 2p et l'ionisation. Comme les valeurs expérimentales intermédiaires ne sont pas connues, ceci met en évidence tout l'intérêt prévisionnel de ce travail. Ce point de vue est encore confirmé par le fait que les deux méthodes restent convergentes (avec les mêmes valeurs des paramètres) pour les cinq états excités calculés et, là encore, la convergence n'est vraisemblablement par fortuite. Nos valeurs, équivalentes à celles de Born à haute énergie, sont plus faibles que ces dernières en dessous de 200 eV ce qui semble plus proche de la réalité puisque, dans les cas connus, l'approximation de Born surestime les sections efficaces à basse énergie. Dans de nombreuses applications, elle était la seule utilisée jusqu'à présent par suite de l'absence d'autres résultats.

Par ailleurs, l'utilisation de nos deux méthodes peut être envisagée pour l'étude des collisions mettant en jeu d'autres particules et d'autres atomes.

Pour terminer, remarquons que, outre les points précédemment mentionnés, il reste à améliorer le calcul de la section efficace d'échange. Néanmoins, malgré toutes leurs imperfections, nos deux approximations présentent l'avantage d'une mise en oeuvre relativement simple. En fait, les difficultés rencontrées par toutes les méthodes actuelles sont inhérentes à la nature même du problème à trois corps qui ne possède pas de solution à variables séparées alors que les solutions approximées sont ramenées à ce cas. Il y a donc là un écueil fondamental qui ne pourrait être surmonté que par la résolution de ce problème.

ANNEXE ET TABLEAUX NUMERIQUES

Les sections efficaces, dans les différentes méthodes exposées précédemment, ont été calculées numériquement sur ordinateur IBM 1800, certains résultats de contrôle ayant été obtenus sur IBM 360-40.

Pour la méthode BM [relation (127a)], l'établissement du programme de calcul ne présente pas de difficulté particulière.

Avec la méthode VPSM, il faut calculer la fonction hypergéométrique et la fonction gamma qui s'introduisent dans l'expression Z donnée par la relation (144b).

La fonction hypergéométrique F(a ; b ; c ; z), dans laquelle a, b, c sont des paramètres arbitraires complexes, est mise sous forme d'une série :

$$F(a\,;b\,;c\,;z) = \sum_{n=0}^{\infty} (a)_n\,(b)_n\,z^n \Big/ \Big[(c)_n\,n!\Big]$$

avec :

$$(a)_o = 1$$

$$(a)_n = a(a+1)\ldots(a+n-1)$$

Elle converge absolument car nous avons toujours $|z| < 1$; quand l'énergie k_o^2 de l'électron incident augmente, $|z|$ est voisin de 1 pour des valeurs de q proches de la borne supérieure de l'intégrale mais la série reste convergente puisque le test de Raabe Re (a+b-c) < 0 est satisfait.

La précision demandée est de 10^{-3} en valeurs relatives pour les parties réelles et imaginaires de cette fonction. La série converge rapidement puisque le nombre maximum de termes est toujours inférieur à 50. Dans le domaine correspondant à $\epsilon = 0{,}1$ et $k_o^2 \geqslant 40\,Ry$. la convergence est plus lente aussi, pour diminuer le temps de calcul et éviter les erreurs de chute, nous n'avons demandé qu'une précision relative de 10^{-2} ce qui réduit le nombre de termes à 20.

Une précision plus grande ne semble pas utile, compte tenu des approximations faites, alors qu'elle accroît notablement le temps de calcul de la section efficace aux énergies élevées.

La fonction gamma est calculée :

soit par la série :

$$\frac{1}{\Gamma(z)} = \sum_{k=1}^{\infty} C_k z^k$$

où les coefficients C_k sont dûs à H.T. Davis, corrigés par Salzer (Table of Higher Mathematical functions - Principia Press - Bloomington)

soit par la série de Stirling (Handbook of Mathematical Functions M. Abramowitzand I.A. Stegum - Dover Public.)

La première est utilisée quand $|\mathrm{Im}\,(z)| < 2$, le test ayant été établi en comparant les résultats numériques avec les valeurs tabulées.

Les intégrations numériques sont obtenues par la méthode classique des polynômes de Tschebysheff. Le nombre de points est déterminé pour que la précision soit supérieure à 10^{-4}. Le point d'indétermination $q^2 = k_o^2 - k_n^2$ est éliminé par une coupure λ sur l'intervalle telle que $\lambda = 10^{-4}$, valeur qui n'affecte pas, dans les cas les plus défavorables, la précision demandée.

Les résultats correspondants sont indiqués, pour chaque transition, dans les tableaux numériques qui suivent. Les énergies sont exprimées en Ry l'échelle des courbes étant, dans la plupart des cas, également graduée en électron-volt. Les valeurs des sections efficaces sont exprimées en unités πa_o^2. On donne trois chiffres significatifs ce qui correspond à la précision réelle qui est généralement nettement supérieure pour $\epsilon > 0{,}3$. Dans certains cas, quatre chiffres significatifs sont indiqués, ce qui correspond à la précision réelle mais, pour toutes les valeurs, le dernier chiffre est arrondi. Les numéros des courbes correspondantes sont également indiqués, parfois en annexe quand il y a lieu. Pour l'échange, les valeurs directes sont rappelées pour faciliter la comparaison. En ce qui concerne l'ionisation, les valeurs correspondant à la variation en fonction de ϵ ont été limitées en raison de la longueur des calculs.

VALEURS NUMERIQUES DES SECTIONS EFFICACES D'EXCITATION $\sigma_{1s\to 2s}$ et $\sigma_{1s\to 2p}$ CALCULEES POUR DIFFERENTES APPROXIMATIONS

	$\sigma_{1s\to 2s}$			$\sigma_{1s\to 2p}$		
E	I	II	III	I	II	III
1,10	—	0,001	$\sim 10^{-3}$	0,001	0,007	0,002
1,20	$\sim 10^{-4}$	0,003	0,002	0,008	0,021	0,010
1,25	0,002	0,005	0,003	0,025	0,030	0,016
1,35	0,006	0,008	0,006	0,091	0,054	0,033
1,40	0,009	0,010	0,008	0,139	0,068	0,044
1,60	0,021	0,017	0,014	0,384	0,134	0,097
1,80	0,032	0,024	0,021	0,636	0,204	0,159
2,00	0,040	0,030	0,027	0,851	0,272	0,222
3,00	0,057	0,046	0,043	1,357	0,501	0,445
4,00	0,057	0,048	0,047	1,417	0,588	0,537
5,00	0,053	0,047	0,045	1,356	0,611	0,564
6,00	0,049	0,044	0,043	1,271	0,605	0,563
7,00	0,045	0,041	0,040	1,184	0,588	0,551
8,00	0,041	0,038	0,037	1,104	0,567	0,532
10,00	0,035	0,033	0,032	0,967	0,522	0,493
20,00	0,020	0,019	0,019	0,597	0,359	0,343
30,00	0,014	0,013	0,013	0,436	0,275	0,264
40,00	0,010	0,010	0,010	0,347	0,224	0,216
50,00	0,008	0,008	0,008	0,290	0,191	0,184

Colonne I : Approximation "Prior" + A [*courbes (a') fig. 3 et 6*]
Colonne II : Approximation "Post" [*courbes (b) fig. 1, 2, 3 et 6*]
Colonne III : Approximation "Post" + A [*courbes (b') fig. 3 et 6*]

VALEURS NUMERIQUES DES SECTIONS EFFICACES D'EXCITATION $\sigma_{1s\to3s}$ et $\sigma_{1s\to4s}$ CALCULEES PAR DIFFERENTES APPROXIMATIONS

	$\sigma_{1s\to3s}$			$\sigma_{1s\to4s}$		
E	I	II	III	I	II	III
1,00	0,115	–	–	0,034	–	–
1,15	0,126	$\sim 10^{-4}$	0,0001	0,044	0,0002	–
1,20	0,124	0,001	0,0001	0,044	0,0006	–
1,25	0,122	0,001	0,0002	0,044	0,0013	–
1,35	0,115	0,004	0,0006	0,042	0,0027	0,0001
1,40	0,112	0,005	0,0008	0,041	0,0034	0,0002
1,60	0,098	0,009	0,0020	0,036	0,0052	0,0006
1,80	0,085	0,011	0,0034	0,032	0,0061	0,0011
2,00	0,075	0,013	0,0046	0,028	0,0065	0,0016
3,00	0,044	0,014	0,0083	0,016	0,0063	0,0030
4,00	0,030	0,013	0,0091	0,011	0,0055	0,0033
5,00	0,022	0,012	0,0090	0,008	0,0048	0,0033
6,00	0,017	0,011	0,0085	0,006	0,0042	0,0031
7,00	0,014	0,010	0,0079	0,005	0,0038	0,0029
8,00	0,012	0,009	0,0074	0,004	0,0034	0,0027
10,00	0,009	0,007	0,0064	0,003	0,0028	0,0024
20,00	0,004	0,004	0,0038	0,002	0,0015	0,0014
30,00	0,003	0,003	0,0027	0,001	0,0010	0,0010
40,00	0,002	0,002	0,0020	0,001	0,0008	0,0008
50,00	0,002	0,002	0,0017	0,001	0,0006	0,0006

Colonne I : Approximation "Prior" VPS [*courbes (a) fig. 4 et 5*]
Colonne II : Approximation "Prior" VPS + A [*courbes (a') fig. 4 et 5*]
Colonne III : Approximation "Post" VPS [avec ou sans A, *courbes (b) et (b') fig. 4 et 5*]

VALEURS NUMERIQUES DE LA SECTION EFFICACE
$\sigma_{1s\to 2s}$ CALCULEES PAR LA METHODE VPSM POUR ϵ VARIABLE
(fig. 7)

E	$\epsilon = 1$	$\epsilon = 0{,}80$	$\epsilon = 0{,}60$	$\epsilon = 0{,}40$	$\epsilon = 0{,}30$	$\epsilon = 0{,}10$
0,8	0,565	0,529	0,510	0,514	0,528	0,588
0,9	0,743	0,711	0,700	0,719	0,744	0,840
1,0	0,755	0,730	0,728	0,757	0,788	0,898
1,2	0,674	0,662	0,671	0,709	0,744	0,857
1,4	0,578	0,574	0,588	0,628	0,662	0,767
1,6	0,497	0,496	0,512	0,551	0,583	0,679
1,8	0,431	0,432	0,449	0,485	0,514	0,601
2,0	0,376	0,380	0,396	0,430	0,456	0,535
2,5	0,281	0,285	0,300	0,328	0,350	0,411
3,0	0,220	0,224	0,237	0,261	0,279	0,329
3,5	0,178	0,183	0,194	0,215	0,230	0,271
4,0	0,148	0,153	0,163	0,181	0,194	0,229
5,0	0,109	0,114	0,122	0,136	0,146	0,172
6,0	0,086	0,090	0,097	0,108	0,116	0,137
7,0	0,070	0,073	0,080	0,089	0,096	0,112
8,0	0,059	0,062	0,068	0,076	0,081	0,095
10	0,045	0,047	0,052	0,058	0,062	0,072
15	0,028	0,030	0,033	0,036	0,039	0,044
20	0,020	0,022	0,024	0,026	0,028	0,031
30	0,013	0,014	0,016	0,017	0,018	0,020
40	0,010	0,011	0,012	0,013	0,013	0,014
50	0,008	0,009	0,009	0,010	0,010	0,011

Remarque : *Pour $\epsilon = 1$ on a les résultats de la méthode VPS [fig. 1 et 3 courbes (a) et fig. 10]*

VALEURS NUMERIQUES DE LA SECTION EFFICACE
$\sigma_{1s\to 2s}$ CALCULEES PAR LA METHODE BM POUR ϵ VARIABLE
(fig. 7)

E	$\epsilon = 1$	$\epsilon = 0{,}8$	$\epsilon = 0{,}6$	$\epsilon = 0{,}4$	$\epsilon = 0{,}3$	$\epsilon = 0{,}1$
0,8	0,162	0,202	0,286	0,395	0,455	0,579
0,9	0,230	0,294	0,415	0,570	0,655	0,832
1,0	0,248	0,321	0,449	0,613	0,703	0,891
1,2	0,247	0,320	0,439	0,592	0,676	0,853
1,4	0,232	0,298	0,403	0,536	0,609	0,765
1,6	0,214	0,273	0,364	0,479	0,543	0,678
1,8	0,198	0,250	0,329	0,428	0,483	0,601
2,0	0,183	0,230	0,298	0,385	0,433	0,536
2,5	0,153	0,189	0,239	0,303	0,338	0,414
3,0	0,132	0,159	0,198	0,246	0,273	0,332
3,5	0,115	0,138	0,168	0,206	0,228	0,274
4,0	0,102	0,121	0,146	0,177	0,194	0,232
5,0	0,083	0,097	0,115	0,136	0,148	0,175
6,0	0,070	0,081	0,094	0,110	0,119	0,139
7,0	0,061	0,069	0,079	0,092	0,099	0,114
8,0	0,053	0,060	0,069	0,079	0,085	0,097
10,0	0,043	0,048	0,054	0,061	0,065	0,073
15,0	0,029	0,032	0,035	0,039	0,041	0,045
20,0	0,022	0,024	0,026	0,028	0,029	0,032
30,0	0,015	0,016	0,017	0,018	0,019	0,020
40,0	0,011	0,012	0,012	0,013	0,013	0,014
50,0	0,009	0,009	0,010	0,010	0,011	0,011

Remarque : *Pour $\epsilon = 1$ on a les résultats de la méthode de Born [fig. 1 courbe (c) et fig. 10]*

VALEURS NUMERIQUES DE LA SECTION EFFICACE
$\sigma_{1s\to 2p}$ CALCULEES PAR LA METHODE VPSM POUR ϵ VARIABLE
(fig. 8)

E	$\epsilon = 1$	$\epsilon = 0{,}8$	$\epsilon = 0{,}6$	$\epsilon = 0{,}4$	$\epsilon = 0{,}3$	$\epsilon = 0{,}1$
0,80	1,838	1,809	1,835	1,936	2,024	2,306
0,90	2,771	2,845	3,000	3,266	3,456	4,013
1,00	3,128	3,278	3,521	3,896	4,153	4,873
1,20	3,266	3,506	3,851	4,349	4,676	5,546
1,40	3,140	3,422	3,814	4,362	4,713	5,621
1,60	2,945	3,244	3,655	4,217	4,571	5,466
1,80	2,741	3,046	3,459	4,017	4,364	5,226
2,00	2,547	2,852	3,261	3,804	4,139	4,959
2,50	2,147	2,435	2,815	3,308	3,605	4,318
3,00	1,849	2,114	2,460	2,901	3,163	3,781
3,50	1,620	1,867	2,180	2,575	2,806	3,345
4,00	1,447	1,673	1,958	2,312	2,518	2,993
5,00	1,197	1,390	1,628	1,918	2,085	2,463
6,00	1,029	1,194	1,397	1,640	1,778	2,089
7,00	0,906	1,051	1,226	1,434	1,551	1,812
8,00	0,811	0,941	1,095	1,276	1,376	1,599
10,00	0,681	0,784	0,906	1,047	1,125	1,296
15,00	0,495	0,564	0,642	0,730	0,778	0,880
20,00	0,397	0,447	0,503	0,565	0,598	0,669
30,00	0,291	0,322	0,357	0,394	0,413	0,455
40,00	0,233	0,255	0,279	0,305	0,318	0,346
50,00	0,195	0,213	0,231	0,250	0,260	0,281

Remarque : *Pour $\epsilon = 1$ on a les résultats de la méthode VPS [fig. 2 et 6 courbes (a) et fig. 11]*

VALEURS NUMERIQUES DE LA SECTION EFFICACE
$\sigma_{1s\to 2p}$ CALCULEES PAR LA METHODE BM POUR ϵ VARIABLE
(fig. 8)

E	$\epsilon = 1$	$\epsilon = 0{,}8$	$\epsilon = 0{,}6$	$\epsilon = 0{,}4$	$\epsilon = 0{,}3$	$\epsilon = 0{,}1$
0,8	0,528	0,746	1,105	1,548	1,786	2,277
0,9	0,859	1,295	1,939	2,714	3,129	3,986
1,0	1,039	1,592	2,375	3,311	3,811	4,848
1,2	1,223	1,872	2,753	3,797	4,358	5,524
1,4	1,299	1,962	2,840	3,877	4,435	5,600
1,6	1,325	1,970	2,809	3,798	4,311	5,448
1,8	1,325	1,939	2,729	3,656	4,157	5,210
2,0	1,310	1,890	2,628	3,493	3,960	4,945
2,5	1,247	1,745	2,366	3,088	3,480	4,308
3,0	1,174	1,604	2,131	2,741	3,072	3,774
3,5	1,104	1,479	1,933	2,456	2,739	3,341
4,0	1,041	1,371	1,767	2,221	2,466	2,989
5,0	0,932	1,196	1,507	1,862	2,054	2,461
6,0	0,844	1,062	1,316	1,603	1,758	2,088
7,0	0,772	0,957	1,170	1,409	1,538	1,812
8,0	0,713	0,872	1,054	1,258	1,367	1,599
10,0	0,620	0,743	0,883	1,038	1,120	1,296
15,0	0,473	0,550	0,635	0,728	0,777	0,881
20,0	0,387	0,441	0,500	0,564	0,598	0,670
30,0	0,288	0,321	0,356	0,394	0,414	0,455
40,0	0,232	0,255	0,279	0,305	0,318	0,346
50,0	0,195	0,213	0,231	0,250	0,260	0,281

Remarque : *Pour $\epsilon = 1$ on a les résultats de la méthode de Born [fig. 2 courbe (c) et 11]*

VALEURS NUMERIQUES DE LA SECTION EFFICACE D'IONISATION CALCULEES PAR LA METHODE VPSM POUR ϵ VARIABLE (fig. 9)

E	$\epsilon = 0,6$	$\epsilon = 0,3$	$\epsilon = 0,1$
1,10	0,296	0,319	0,360
1,30	1,095	1,225	1,412
1,60	1,916	2,210	2,586
2,00	2,375	2,803	3,311
3,00	2,337	2,837	3,378
5,00	1,677	2,073	2,467
10,00	0,898	1,109	1,297
40,00	0,251	0,288	0,316

VALEURS NUMERIQUES DE LA SECTION EFFICACE D'IONISATION CALCULEES PAR LA METHODE BM POUR ϵ VARIABLE (fig. 9)

E	$\epsilon = 0,8$	$\epsilon = 0,6$	$\epsilon = 0,3$	$\epsilon = 0,1$
1,10	0,132	0,182	0,282	0,357
1,30	0,526	0,728	1,119	1,410
1,60	1,002	1,370	2,068	2,591
2,00	1,353	1,813	2,676	3,327
3,00	1,537	1,977	2,791	3,409
5,00	1,288	1,578	2,102	2,501
10,00	0,799	0,927	1,150	1,318
40,00	0,244	0,264	0,296	0,319

VALEURS NUMERIQUES DES SECTIONS EFFICACES D'EXCITATION $\sigma_{1s\to 2s}$ et $\sigma_{1s\to 2p}$ CALCULEES PAR LA METHODE VPS POUR θ VARIABLE (fig. 10 et 11)

	$\sigma_{1s\to 2s}$			$\sigma_{1s\to 2p}$		
E	$\theta = 0{,}7$	$\theta = 0{,}6$	$\theta = 0{,}4$	$\theta = 0{,}7$	$\theta = 0{,}6$	$\theta = 0{,}4$
0,8	0,274	0,285	0,324	0,696	0,741	0,896
0,9	0,338	0,355	0,413	0,839	0,922	1,198
1,0	0,333	0,352	0,415	0,853	0,958	1,297
1,2	0,290	0,309	0,371	0,827	0,952	1,343
1,4	0,248	0,267	0,323	0,793	0,925	1,321
1,6	0,215	0,232	0,282	0,761	0,892	1,276
1,8	0,189	0,204	0,248	0,731	0,859	1,224
2,0	0,168	0,182	0,221	0,705	0,827	1,172
2,5	0,130	0,141	0,171	0,648	0,758	1,052
3,0	0,105	0,114	0,138	0,601	0,698	0,953
3,5	0,088	0,096	0,114	0,563	0,649	0,872
4,0	0,076	0,082	0,097	0,531	0,608	0,806
5,0	0,059	0,063	0,075	0,480	0,545	0,704
6,0	0,048	0,051	0,060	0,442	0,497	0,630
7,0	0,040	0,043	0,050	0,411	0,459	0,574
8,0	0,035	0,037	0,043	0,386	0,429	0,529
10,0	0,027	0,029	0,033	0,348	0,382	0,462
15,0	0,018	0,019	0,022	0,285	0,308	0,361
20,0	0,014	0,015	0,016	0,246	0,263	0,301
30,0	0,010	0,010	0,011	0,196	0,208	0,232
40,0	0,008	0,008	0,009	0,166	0,174	0,192
50,0	0,006	0,007	0,007	0,144	0,151	0,164

VALEURS NUMERIQUES DES SECTIONS EFFICACES D'IONISATION CALCULEES PAR DIFFERENTES METHODES

(fig. 12)

E	Born	VPS	VPS $\theta = 0{,}6$	VPS $\theta = 0{,}4$
1,1	0,103	0,306	0,143	0,170
1,2	0,249	0,704	0,308	0,375
1,3	0,394	1,064	0,450	0,557
1,4	0,526	1,363	0,566	0,709
1,6	0,745	1,785	0,732	0,929
1,8	0,905	2,025	0,834	1,065
2,0	1,017	2,143	0,893	1,143
2,2	1,093	2,183	0,924	1,183
2,5	1,161	2,159	0,938	1,198
3,0	1,196	2,019	0,915	1,160
3,5	1,181	1,844	0,869	1,092
4,0	1,145	1,675	0,816	1,018
5,0	1,051	1,390	0,717	0,882
6,0	0,958	1,177	0,634	0,771
7,0	0,876	1,018	0,567	0,683
8,0	0,804	0,895	0,514	0,613
10,0	0,689	0,720	0,434	0,511
15,0	0,508	0,491	0,321	0,369
20,0	0,404	0,381	0,261	0,295
40,0	0,226	0,210	0,161	0,176
50,0	0,187	0,175	0,137	0,149

Remarque : *Les deux premières colonnes correspondent également aux courbes $\epsilon = 1$ BM et VPSM fig. 9*

VALEURS NUMERIQUES DE DIFFERENTES TRANSITIONS CALCULEES PAR LES METHODES VPSM ($\epsilon = 0,4$; $\theta = 0,8$) et BM ($\epsilon = 0,4$; $\theta = 0,7$) (fig. 13 ; 14 et 15)

	$\sigma_{1s \to 2s}$		$\sigma_{1s \to 2p}$		Ionisation		
E	BM	VPSM	BM	VPSM	E	BM	VPSM
0,8	0,038	0,084	0,142	0,243	1,1	0,034	0,051
0,9	0,062	0,112	0,280	0,363	1,2	0,090	0,121
1,0	0,075	0,119	0,382	0,433	1,3	0,155	0,190
1,2	0,087	0,117	0,526	0,529	1,4	0,220	0,255
1,4	0,092	0,111	0,620	0,592	1,6	0,343	0,368
1,6	0,093	0,104	0,683	0,634	1,8	0,447	0,456
1,8	0,091	0,098	0,725	0,663	2,0	0,533	0,525
2,0	0,089	0,093	0,753	0,681	2,2	0,600	0,576
2,5	0,083	0,081	0,783	0,701	2,5	0,673	0,629
3,0	0,076	0,071	0,783	0,698	3,0	0,743	0,674
3,5	0,070	0,064	0,770	0,685	3,5	0,771	0,687
4,0	0,065	0,057	0,750	0,669	4,0	0,777	0,683
5,0	0,056	0,048	0,708	0,631	5,0	0,754	0,652
6,0	0,049	0,042	0,661	0,593	6,0	0,714	0,613
7,0	0,044	0,038	0,621	0,558	7,0	0,671	0,574
8,0	0,040	0,034	0,584	0,529	8,0	0,630	0,539
10,0	0,033	0,028	0,523	0,476	10,0	0,558	0,479
15,0	0,024	0,020	0,418	0,384	15,0	0,432	0,376
20,0	0,018	0,016	0,347	0,324	20,0	0,352	0,311
30,0	0,012	0,011	0,265	0,250	40,0	0,207	0,190
40,0	0,010	0,009	0,216	0,206	50,0	0,172	0,160
50,0	0,008	0,007	0,184	0,176			

VALEURS NUMERIQUES DES SECTIONS EFFICACES D'EXCITATION
$\sigma_{1s\to 2s}$ et $\sigma_{1s\to 2p}$ CALCULEES PAR LES METHODES BM
($\epsilon = 0{,}4$; $\theta = 0{,}7$) et VPSM ($\epsilon = 0{,}4$; $\theta = 0{,}8$)
l'échange étant considéré (fig. 13 et 14)

	$\sigma_{1s\to 2s}$				$\sigma_{1s\to 2p}$			
E	I	II	III	IV	I	II	III	IV
1,0	0,075	0,189	0,119	0,152	0,382	0,659	0,433	0,524
1,2	0,087	0,190	0,117	0,220	0,526	0,762	0,529	0,759
1,4	0,092	0,178	0,111	0,192	0,620	0,820	0,592	0,802
1,6	0,093	0,163	0,104	0,143	0,683	0,853	0,634	0,762
1,8	0,091	0,149	0,098	0,117	0,725	0,871	0,663	0,731
2,0	0,089	0,137	0,093	0,107	0,753	0,878	0,681	0,719
2,5	0,083	0,113	0,081	0,094	0,783	0,871	0,701	0,710
3,0	0,076	0,096	0,071	0,079	0,783	0,847	0,698	0,692
3,5	0,070	0,084	0,064	0,065	0,770	0,818	0,685	0,670
4,0	0,065	0,075	0,057	0,057	0,750	0,786	0,669	0,651
5,0	0,056	0,061	0,048	0,047	0,708	0,727	0,631	0,628
6,0	0,049	0,052	0,042	0,042	0,661	0,675	0,593	0,588
7,0	0,044	0,046	0,038	0,038	0,621	0,629	0,558	0,558
8,0	0,040	0,040	0,034	0,035	0,584	0,590	0,529	0,530
10,0	0,033	0,033	0,028	0,029	0,523	0,525	0,476	0,480
15,0	0,024	0,024	0,020	0,021	0,418	0,416	0,384	0,387
20,0	0,018	0,018	0,016	0,016	0,347	0,347	0,324	0,326
30,0	0,012	0,012	0,011	0,011	0,265	0,265	0,250	0,250
40,0	0,010	0,010	0,009	0,009	0,216	0,216	0,206	0,206
50,0	0,008	0,008	0,007	0,007	0,184	0,184	0,176	0,176

Colonne I : *Section efficace directe calculée par l'approximation BM*
Colonne II : *Section efficace totale calculée par l'approximation BM*
Colonne III : *Section efficace directe calculée par l'approximation VPSM*
Colonne IV : *Section efficace totale calculée par l'approximation VPSM*

VALEURS NUMERIQUES DES SECTIONS EFFICACES D'EXCITATION CALCULEES PAR LES METHODES DE BORN, BM, ($\epsilon = 0,4$; $\theta = 0,7$) et VPSM ($\epsilon = 0,4$; $\theta = 0,8$) (fig. 18 et 19)

	$\sigma_{1s \to 3s}$			$\sigma_{1s \to 4s}$		
E	B	BM	VPSM	B	BM	VPSM
1,0	0,0370	0,0106	0,0188	0,0108	0,0030	0,0056
1,2	0,0447	0,0153	0,0217	0,0158	0,0053	0,0077
1,4	0,0440	0,0170	0,0214	0,0160	0,0061	0,0078
1,6	0,0415	0,0175	0,0204	0,0152	0,0064	0,0075
1,8	0,0387	0,0175	0,0192	0,0143	0,0064	0,0071
2,0	0,0360	0,0172	0,0182	0,0133	0,0063	0,0067
2,5	0,0303	0,0161	0,0158	0,0113	0,0060	0,0059
3,0	0,0261	0,0149	0,0140	0,0097	0,0055	0,0052
3,5	0,0228	0,0137	0,0125	0,0085	0,0051	0,0046
4,0	0,0202	0,0127	0,0113	0,0075	0,0047	0,0042
5,0	0,0165	0,0110	0,0095	0,0061	0,0041	0,0035
6,0	0,0139	0,0097	0,0083	0,0052	0,0036	0,0031
7,0	0,0120	0,0086	0,0073	0,0045	0,0032	0,0027
8,0	0,0106	0,0078	0,0066	0,0039	0,0029	0,0024
10,0	0,0085	0,0065	0,0055	0,0032	0,0024	0,0020
15,0	0,0058	0,0047	0,0040	0,0021	0,0017	0,0015
20,0	0,0043	0,0036	0,0032	0,0016	0,0013	0,0012
30,0	0,0029	0,0025	0,0023	0,0011	0,0009	0,0008
40,0	0,0022	0,0019	0,0018	0,0008	0,0007	0,0007
50,0	0,0018	0,0016	0,0015	0,0007	0,0006	0,0005

VALEURS NUMERIQUES DES SECTIONS EFFICACES D'EXCITATION CALCULEES PAR LES METHODES DE BORN, BM, ($\epsilon = 0{,}4$; $\theta = 0{,}7$) VPSM ($\epsilon = 0{,}4$; $\theta = 0{,}8$) (fig. 20 et 21)

	$\sigma_{1s \to 3p}$			$\sigma_{1s \to 4p}$		
E	B	BM	VPSM	B	BM	VPSM
1,0	0,1280	0,0430	0,0584	0,0351	0,0111	0,0168
1,2	0,1868	0,0769	0,0834	0,0625	0,0253	0,0283
1,4	0,2103	0,0976	0,0972	0,0728	0,0334	0,0338
1,6	0,2200	0,1111	0,1060	0,0770	0,0386	0,0372
1,8	0,2228	0,1200	0,1118	0,0785	0,0420	0,0394
2,0	0,2220	0,1258	0,1155	0,0785	0,0442	0,0408
2,5	0,2132	0,1324	0,1193	0,0757	0,0468	0,0423
3,0	0,2013	0,1330	0,1190	0,0715	0,0471	0,0422
3,5	0,1894	0,1310	0,1168	0,0673	0,0464	0,0414
4,0	0,1784	0,1277	0,1138	0,0634	0,0453	0,0403
5,0	0,1594	0,1201	0,1071	0,0566	0,0426	0,0379
6,0	0,1441	0,1124	0,1006	0,0512	0,0398	0,0356
7,0	0,1317	0,1054	0,0946	0,0467	0,0373	0,0335
8,0	0,1213	0,0991	0,0893	0,0430	0,0351	0,0316
10,0	0,1052	0,0884	0,0803	0,0373	0,0313	0,0284
15,0	0,0799	0,0700	0,0645	0,0283	0,0248	0,0228
20,0	0,0651	0,0584	0,0543	0,0230	0,0206	0,0191
30,0	0,0483	0,0444	0,0418	0,0170	0,0157	0,0147
40,0	0,0388	0,0362	0,0343	0,0137	0,0127	0,0121
50,0	0,0326	0,0307	0,0293	0,0115	0,0108	0,0103

VALEURS NUMERIQUES DE LA SECTION EFFICACE D'EXCITATION $\sigma_{1s \to 3d}$ CALCULEES PAR LES METHODES DE BORN, BM ($\epsilon = 0,4$; $\theta = 0,7$) et VPSM ($\epsilon = 0,4$; $\theta = 0,8$) (fig. 22)

E	B	BM	VPSM
1	0,0137	0,0047	0,0062
1,2	0,0196	0,0082	0,0087
1,4	0,0214	0,0100	0,0099
1,6	0,0217	0,0110	0,0105
1,8	0,0214	0,0115	0,0107
2,0	0,0207	0,0117	0,0108
2,5	0,0187	0,0116	0,0104
3,0	0,0167	0,0110	0,0098
3,5	0,0151	0,0104	0,0092
4,0	0,0137	0,0097	0,0086
5,0	0,0115	0,0086	0,0076
6,0	0,0098	0,0076	0,0067
7,0	0,0086	0,0068	0,0060
8,0	0,0077	0,0062	0,0055
10	0,0063	0,0052	0,0046
15	0,0043	0,0037	0,0034
20	0,0033	0,0029	0,0026
30	0,0022	0,0020	0,0019
40	0,0017	0,0015	0,0014
50	0,0013	0,0012	0,0012

VALEURS NUMERIQUES DE DIFFERENTES SECTIONS EFFICACES D'EXCITATION CALCULEES PAR LES METHODES BM ($\epsilon = 0{,}4$; $\theta = 0{,}7$) et VPSM ($\epsilon = 0{,}4$; $\theta = 0{,}8$) l'échange étant considéré.

	$\sigma_{1s\text{-}3s}$				$\sigma_{1s\text{-}4s}$			
E	I	II	III	IV	I	II	III	IV
1,0	0,0106	0,0327	0,0188	0,0259	0,0030	0,0099	0,0056	0,0070
1,5	0,0173	0,0369	0,0209	0,0367	0,0063	0,0141	0,0077	0,0128
2,0	0,0172	0,0293	0,0182	0,0211	0,0063	0,0112	0,0067	0,0082
3,0	0,0149	0,0199	0,0140	0,0159	0,0055	0,0075	0,0052	0,0062
4,0	0,0127	0,0151	0,0113	0,0112	0,0047	0,0057	0,0042	0,0041
5,0	0,0110	0,0123	0,0095	0,0092	0,0041	0,0046	0,0035	0,0034
7,5	0,0082	0,0085	0,0070	0,0072	0,0030	0,0032	0,0026	0,0027
10,0	0,0065	0,0066	0,0055	0,0059	0,0024	0,0025	0,0020	0,0022
20,0	0,0036	0,0036	0,0032	0,0033	0,0013	0,0013	0,0012	0,0012
50,0	0,0016	0,0016	0,0015	0,0015	0,0006	0,0006	0,0005	0,0005

	$\sigma_{1s\text{-}3p}$				$\sigma_{1s\text{-}4p}$			
1,0	0,0430	0,1052	0,0584	0,0745	0,0111	0,0315	0,0168	0,0213
1,5	0,1051	0,1539	0,1021	0,1402	0,0363	0,0560	0,0357	0,0502
2,0	0,1258	0,1580	0,1155	0,1230	0,0442	0,0571	0,0408	0,0436
3,0	0,1330	0,1487	0,1190	0,1181	0,0471	0,0533	0,0422	0,0420
4,0	0,1277	0,1363	0,1138	0,1099	0,0453	0,0486	0,0403	0,0389
5,0	0,1201	0,1251	0,1071	0,1044	0,0426	0,0445	0,0379	0,0370
7,5	0,1021	0,1037	0,0919	0,0923	0,0362	0,0368	0,0325	0,0327
10,0	0,0884	0,0890	0,0803	0,0814	0,0313	0,0315	0,0284	0,0288
20,0	0,0584	0,0583	0,0543	0,0548	0,0206	0,0206	0,0191	0,0193
50,0	0,0307	0,0306	0,0293	0,0293	0,0108	0,0108	0,0103	0,0103

	$\sigma_{1s\text{-}3d}$			
1,0	0,0047	0,0111	0,0062	0,0079
1,5	0,0106	0,0154	0,0103	0,0138
2,0	0,0117	0,0148	0,0108	0,0114
3,0	0,0110	0,0124	0,0098	0,0097
4,0	0,0097	0,0105	0,0086	0,0083
5,0	0,0086	0,0090	0,0076	0,0073
7,5	0,0065	0,0066	0,0058	0,0058
10,0	0,0052	0,0052	0,0046	0,0047
20,0	0,0029	0,0029	0,0026	0,0027
50,0	0,0012	0,0012	0,0012	0,0012

Colonne I : *Section efficace directe calculée par l'approximation BM*
Colonne II : *Section efficace totale calculée par l'approximation BM*
Colonne III : *Section efficace directe calculée par l'approximation VPSM*
Colonne IV : *Section efficace totale calculée par l'approximation VPSM*

REFERENCES

(1) – Lippmann. B.A. and Schwinger J.
Phys. Rev. 79, 469 (1950)

(2) – Gell-Mann. M. and Goldberger. M.L.
Phys. Rev. 91, 398 (1953)

(3) – Roman. P.
Advanced Quantum Theory
(Addison Wesley - Reading - Mass. 1965)

(4) – Ta-You-Wu and Takashi Ohmura
Quantum theory of Scattering
(Prentice Hall International - 1962)

(5) – Goldberger M.L. and Watson K.M.
Collision theory
(Wiley - N.Y - 1964)

(6) – Gerjuoy E.
Annals of Physics - 5, 58-93 (1958)

(7) – Mott N.F. and Massey H.S.W.
Theory of Atomic Collisions
(Clarendon Press - Oxford 1949)

(8) – Schiff L.I.
Quantum Mechanics
(Mac. Graw. Hill - N.Y. - 1955)

(9) – Wu T.Y.
Physics. Rev. 87 - 1010 (1952)

(11) – Moses H.E.
Phys. Rev. 91, 185 (1953)

(12) – Altschuler S.
Phys. Rev. 91, 1167 (1953)

(13) – Altschuler S.
Phys. Rev. 92, 1157 (1953)

(14) – Borowitz S. and Freidman B.
Phys. Rev. - 91, 398 (1953)

(15) – Lippmann B.A.
Phys. Rev. 102 - 264 (1956)

(16) – Rodberg L.S. and Thaler R.M.
Introduction to the Quantum theory of scattering
(Academic Press N.Y. and London 1967)

(17) – Bates D.R.
Atomic and molecular Processes
(Academic Press N.Y. and London 1962)

(18) – Burke P.G. and Schmith K.
Rev. Modern. Phys. 34, 458 (1962)

(19) – Moiseiwitsch B.L. and Smith S.J.
Rev. Modern Phys. 40, 238 (1968)

(20) – Rudge M.R.M. and Seaton M.J.
Proces. Roy. Soc. A. 283 - 262 (1965)

(21) – Ya Veldre V. Ya, Damburg R. Ya et Peterkop R.K.
Atomic collisions (London Butterworths 1966)

(22) – Mc Dowell M.R.C.
Proceedings of the III rd. International Conference of the Physics of Electronic and Atomic Collisions
(London - July 22-26 th - 1963)

(23) – Bates D.R. and Esterman J.
Advanced Atomic and Molecular Physics
(Academic Press N.Y. London 1966).

(24) – Bransden B.H. and Mc. Kee J.S.C.
Proc, Phys. Soc. A 69, 422 (1956)

(25) – Marriott R.
Proc. Phys. Soc 72, 121 (1958)

(26) – Smith K., Miller W.F. and Mumford A.J.P.
Proc. Phys. Soc. 76, 559 (1960)

(27) – Burke P.G., Schey H.M. and Smith K.
Phys. Rev. 129, 1258 (1963)

(28) – Omidvar K.
Nasa Technical Note T.N.D. 2145 (1964)

(29) – Burke P.G., Ormonde S. and Whitaker W.
Phys. Rev. Let. 17, 800 (1966)
Proc. Phys. Soc. 92, 319 (1967)

(30) – Burke P.G. and Taylor A.J.
Proc. Phys. Soc. 88, 549 (1966)

(31) – Taylor A.J. and Burke P.G.
Proc. Phys. Soc. 92, 336 (1967)

(32) – Erskine G.A. and Massey H.S.W.
Proc. Roy. Soc (London) A 212, 521 (1952)

(33) – Ochkur V.I.
Vest. Leningrad Univ. Ser. Fiz i. Khim 4, 53 (1958)

(34) – Kashata S. and Massey H.S.W.
Proc. Phys. Soc. London 71, 574 (1958)

(35) – Vainshtein L.A.
Opt. i. Spektroskopiya 11, 301 (1961)
trad. anglaise : Opt. Spectry USSR 11, 163 (1961)

(36) – Bethe H.A.
Ann. Phys. 5, 325 (1930)

(37) – Bates D.R. and Miskelly D.
Proc. Phys. Soc. (London) A 70 539 (1957)

(38) – Vainshtein L.A.
Opt. i. Spektroskopiya 11, 301 (1961)
trad. anglaise : Opt. Spectry USSR 11, 163 (1961)

(39) – Veldre. V. Ya - Rabik L.L.
Opt. i. Spektroskopiya 19, 474 (1965)
trad. anglaise : Opt. Spectry USSR 19, 265 (1965)

(40) – Starostin A.N.
Soviet Physics JETP 25, 80 (1967)

(41) – Oppenheimer J.R.
Phys. Rev. 32, 361 (1928)

(42) – Bell K,L. and Moiseiwitsch B.L.
Proc. Roy Soc. (London) A 276, 346 (1963)

(43) – Bell K.L.
Proc. Phys. Soc. (London) 86, 246 (1965)

(44) – Ochkur V.I.
Soviet Physics JETP - 18, 503 (1964)

(45) – Inokuti M. -
J. Phys. Soc. Japan - 22, 971 (1967)

(46) – Chew G.F.
Phys. Rev. 80, 196 (1950)

(47) – Akerib R. and Borowitz S.
Physical Review 122, 1177 (1961)

(48) – Coleman J.P. and Mc. Dowell M.R.C.
Proc. Phys. Soc. 87, 879 (1966)

(49) – Coleman J.P.
Thèse - University of London (1965)

(50) – Fite W.L.and Brackmann R.T.
Phys. Rev. 112, 1151 (1958)

(51) – Fite W.L., Stebbings R.F. and and Brackmann R.T.
Phys. Rev. 116, 356 (1959)

(52) – Long R.L., Cox D.M. and Smith S.J.
(travail non publié cité dans la référence /19/ p. 290)

(53) – Lichten W. and Schultz S.
Phys. Rev. 116, 1132 (1959)

(54) – Stebbings R.F., Fite W.L., Hummer D. G. and Brackmann R.T.
Phys. Rev. 119, 1939 (1960)

(55) – Hils D., Kleinpoppen H., and Koschmeider H.
Proc. Phys. Soc. (London) 89, 35 (1966)

(56) – Fite W.L. and Brackmann R.T.
Phys. Rev. 112, 1141 (1958)

(57) – Boyd R.L.F. and Boksenberg A.
Proc. 4 th. Int. Conf. Ioniz. Phenom. Gases p. 529
(North Holland 1960)

(58) – Vainshtein L.A., Presnyakov L. and Sobelman I.
zh. Eksperim. i. Theor. Fiz 45, 2015 (1963)
Trad. anglaise : Soviet Phys. JETP 18, 1383 (1964)

(59) – Mc. Daniel and M.R.C. Mc. Dowell
Case studies in atomic Collision Physics.
(North - Holland 1969) Chapitre 3

(60) – Crothers D.S.F. and Mc. Carroll R.
Proc. Phys. Soc. 86 (1965) 753

(61) – Landau L.D. and Lifshitz E.M.
Quantum mechanics (Pergamon Press 1958)

(62) – Nordsieck A.
Phys. Rev. 93, 785 (1954)

(63) – Crothers D.S.F.
Proc. Phys. Soc. 91, 855 (1967)

(64) – Crothers D.S.F.
(Thèse University of Belfast - 1966)

(65) – Rudge M.R H.
Rev. Mod. Phys. 40, 564 (1968)

(66) – Geltman S. -
Topics in Atomic Collision Theory
(Academic Press N.Y. - London 1969 p. 135)

(67) – Kyle L.H. and Omidvar K.
Phys. Review 176, 164 (1968)

(68) – Kyle L.H. and Mc. Dowell M.R.C.
J. Phys. B (Atom. molec. Phys.) 2, 15 (1969)

(69) – Mc. Dowell, M.R.C.
Proc. Intern. Conf. Physic. Electronic and Atomic Collisions
(N.Y. : Science Bookcrafters) p. 20

(70) – M. Felden
Etude des variations de σ (VPSM et BM) en fonction
des paramètres ϵ et θ - Rapport interne LPMI.

TABLE DES MATIERES

Pages

INTRODUCTION 1

PREMIERE PARTIE

A) RAPPELS CONCERNANT LA DETERMINATION QUANTIQUE DES SECTIONS EFFICACES DE COLLISION 5

I – Etude des collisions directes $A + B \rightarrow A^* + B^*$ 6

II – Etude des collisions avec réarrangement $A + B \rightarrow C + D$ cas de l'échange 13

B) CAS DU CHOC ELECTRON – ATOME D'HYDROGENE SECTION EFFICACE TOTALE D'EXCITATION 19

I Section efficace d'excitation directe 19

II – Section efficace d'excitation et d'échange 20

III – Section efficace totale d'excitation 21

IV – Section efficace d'ionisation 22

C) APERCU SUR LES PRINCIPAUX RESULTATS THEORIQUES ET EXPRIMENTAUX ACTUELS CONCERNANT LA SECTION EFFICACE DE CHOC ELECTRON – ATOME D'HYDROGENE 23

I – Aspects théoriques 23

II – Résultats expérimentaux 27

DEUXIEME PARTIE

ETUDE DES APPROXIMATIONS DANS LA METHODE DES CORRELATIONS. MODIFICATIONS ET FONCTIONS D'ONDES CORRESPONDANTES 29

I – Position du problème 29

II Premier modification 32

III – Deuxième modification : Introduction d'un facteur correctif du potentiel d'interaction 37

Pages

TROISIEME PARTIE

DETERMINATION DES AMPLITUDES DE TRANSITION DANS LES DIFFERENTES APPROXIMATIONS. SECTIONS EFFICACES DIRECTES D'EXCITATION ET D'IONISATIONS. 41

I – Calcul de l'amplitude de transition dans la méthode V.P.S. modifiée – (notée VPSM) 41

II – Calcul de l'amplitude de transition dans la méthode de Born modifiée – (notée B.M.) 45

III – Calcul de l'amplitude de transition en considérant le terme A 47

IV – Calcul des transitions $G_{on}(\vec{q})$ correspondant aux différents états excités et à l'ionisation 49

QUATRIEME PARTIE

RESULTATS NUMERIQUES – DISCUSSION ET INTERPRETATION INFLUENCE DE L'ECHANGE 55

I – Etude de la première modification : Influence du Terme A 56

II – Etude de la deuxième modification : Influence du facteur correctif ϵ sur les approximations. Correction des effets de l'approximation en pic et du potentiel modifié. 61

III – Comparaison des sections efficaces déterminées par les méthodes VPSM et BM avec les résultats expérimentaux – Détermination des valeurs numériques des paramètres ϵ et θ. 70

IV – Introduction de l'échange dans les méthodes VPSM et BM 74

V – Etude de quelques états excités 84

CONCLUSION 89

ANNEXE ET TABLEAUX NUMERIQUES 93

REFERENCES 111

Nom de l'Etudiant : FELDEN Madeleine

Nature de la Thèse : DOCTORAT ES SCIENCES PHYSIQUES

Vu, Approuvé

et Permis d'imprimer

NANCY, le

Le Doyen,

J. AUBRY

Cet exemplaire est imprimé
à des fins particulières et ne
peut en aucun cas être vendu.

Achevé d'imprimer le 30 Septembre 1970
à l'Atelier de Documentation Universitaire
3, Rue Sellier NANCY

Dépot légal N° 677 L.P.M.I. Editeur
3ème trimestre 1970

N° Archives originales CNRS 4717 — Permis d'imprimer 3 Juin 1970